TURING 图灵程序设计丛书

R in Action
Data Analysis and Graphics with R

R语言实战

[美] Robert I. Kabacoff 著
高涛 肖楠 陈钢 译

人民邮电出版社
北京

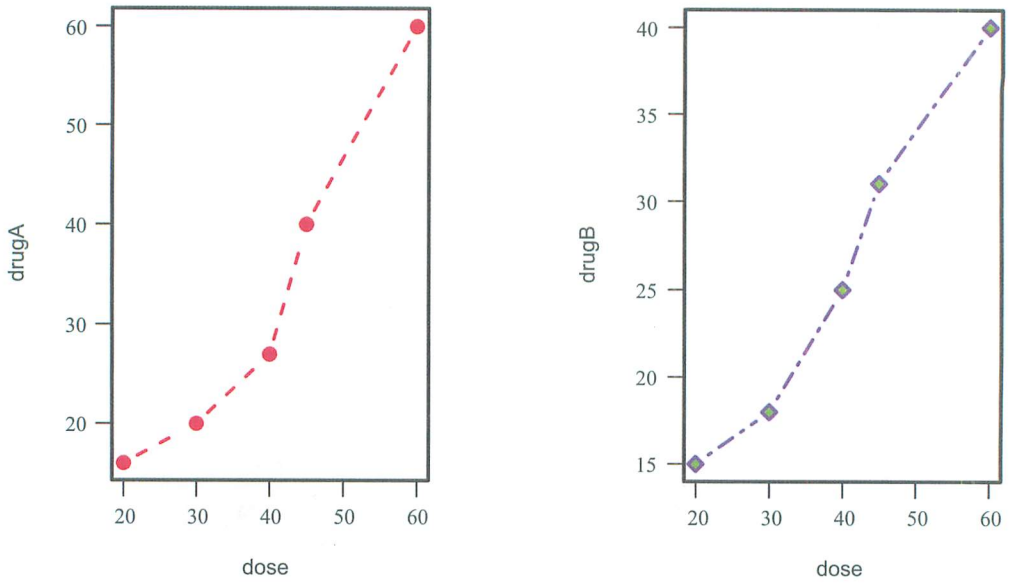


图 3-7　药物 A 和药物 B 剂量与响应的折线图

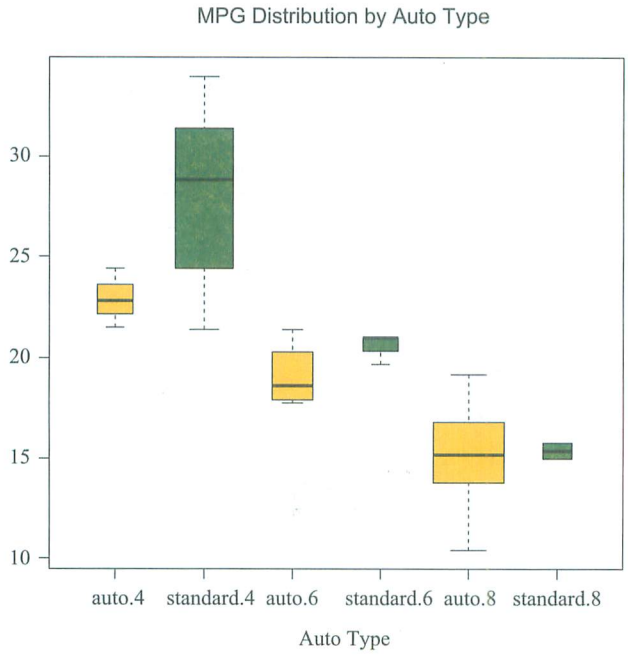


图 6-14　不同变速箱类型和汽缸数量车型的箱线图

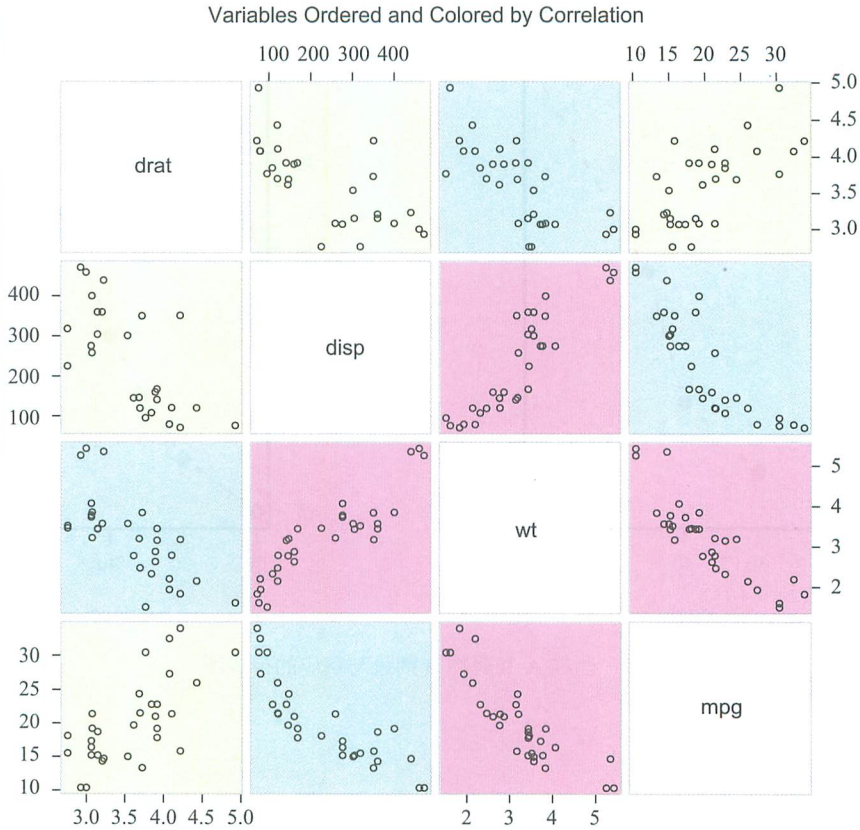


图 11-6　gclus 包中的 cpairs() 函数生成的散点图矩阵。变量离主对角线越近，相关性越高

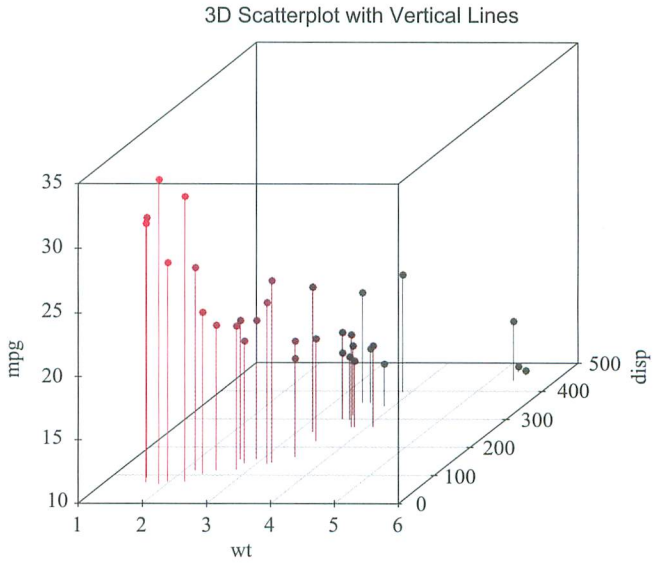


图 11-12　添加了垂直线和阴影的三维散点图

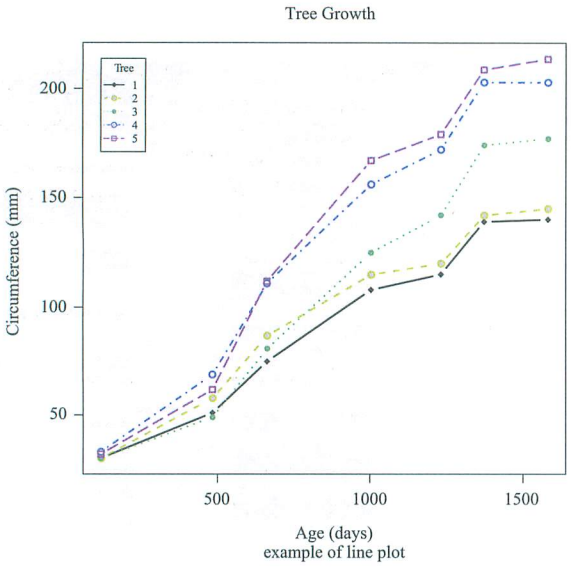


图 11-19　展示五种橘树生长状况的折线图

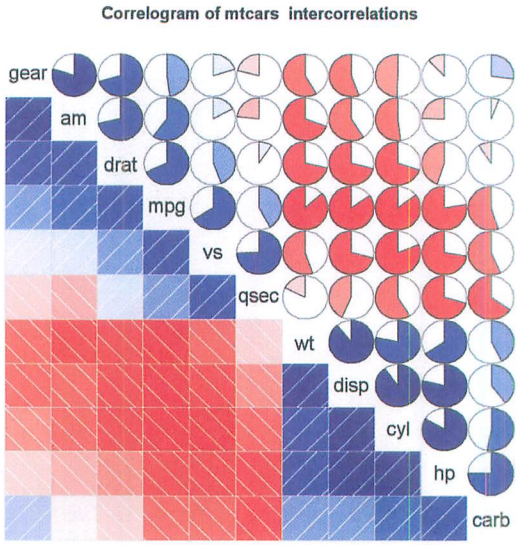


图 11-20　mtcars 数据框中变量的相关系数图。矩阵行和列都通过主成分分析法进行了重新排序

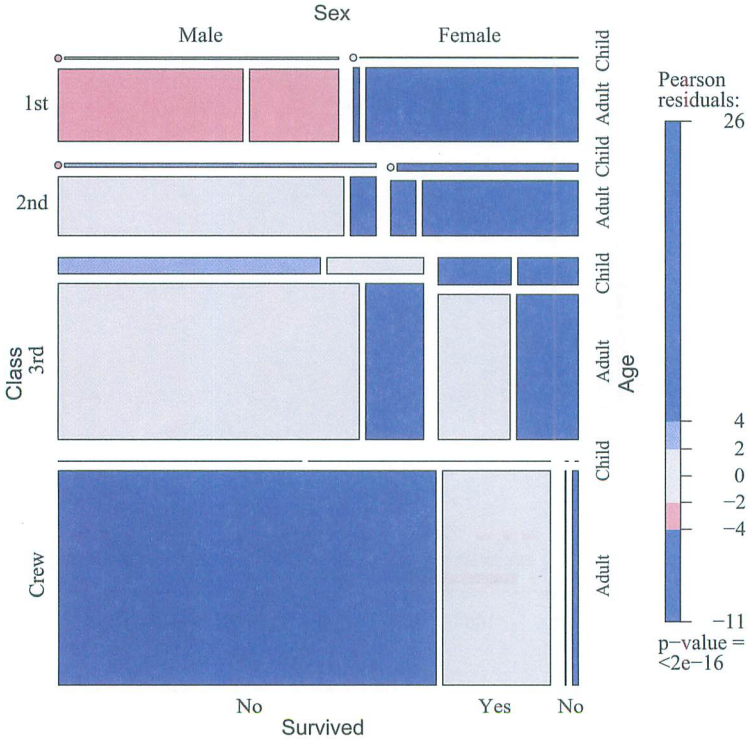


图 11-23　按船舱等级、乘客性别和年龄层绘制的泰坦尼克号幸存者的马赛克图

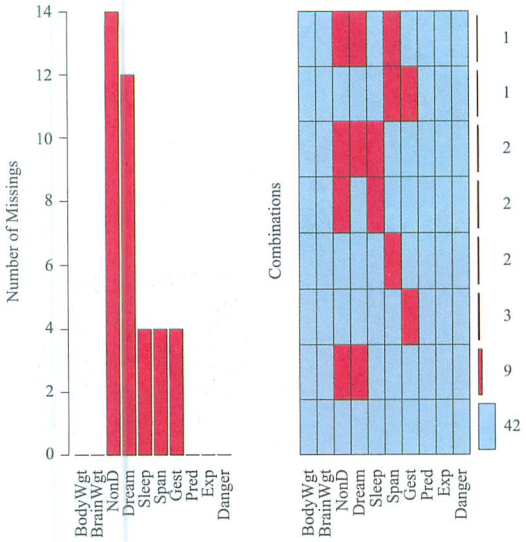


图 15-2　aggr() 生成的 sleep 数据集的缺失值模式图形

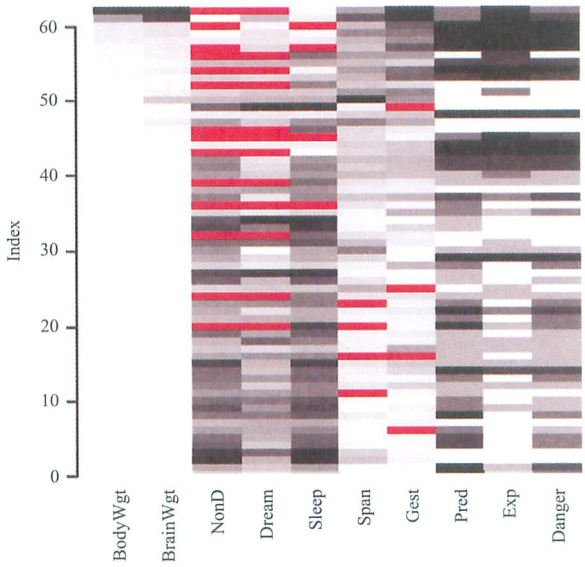


图 15-3　sleep 数据集按实例（行）展示真实值和缺失值的矩阵图。矩阵按 BodyWgt 重排

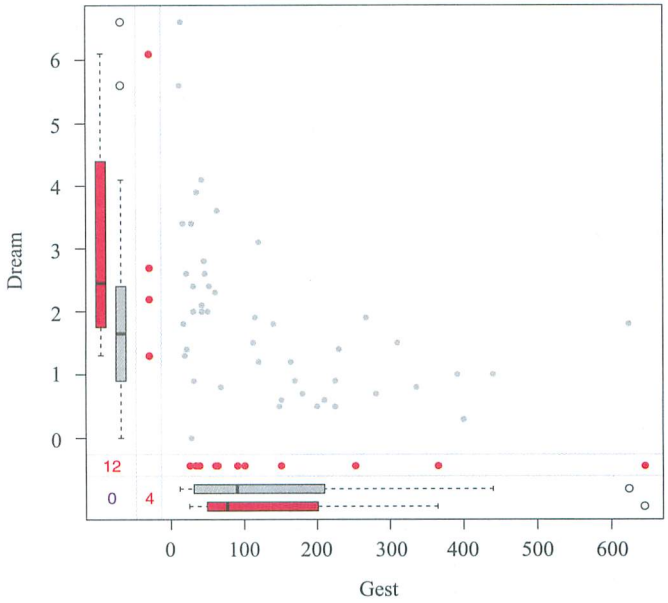


图 15-4　做梦时长与妊娠期时长的散点图，边界展示了缺失数据的信息

图书在版编目（CIP）数据

R语言实战 / (美) 卡巴科弗 (Kabacoff,R.I.) 著 ；
高涛，肖楠，陈钢译. -- 北京 ：人民邮电出版社，
2013.1
（图灵程序设计丛书）
书名原文：R in Action:Data Analysis and
Graphics with R
ISBN 978-7-115-29990-1

Ⅰ. ①R… Ⅱ. ①卡… ②高… ③肖… ④陈… Ⅲ. ①
程序语言－程序设计 Ⅳ. ①TP312

中国版本图书馆CIP数据核字(2012)第273596号

内 容 提 要

R是一个开源项目，具有强大的统计计算及制图能力，是从大数据中获取有用信息的绝佳工具，在各种主流操作系统上都可以安装使用，其基本安装就提供了数以百计的数据管理、统计和图形函数。另外，社区开发的数以千计的扩展（包）为R增加了更多强大功能。

本书注重实用性，是一本全面而细致的R指南，高度概括了该软件和它的强大功能，展示了实用的统计示例，且对于难以用传统方法处理的凌乱、不完整和非正态的数据给出了优雅的处理方法。作者不仅仅探讨统计分析，还阐述了大量探索和展示数据的图形功能。

本书适合数据分析人员及R用户学习参考。

图灵程序设计丛书

R语言实战

◆ 著　[美] Robert I. Kabacoff
译　高 涛 肖 楠 陈 钢
责任编辑　毛倩倩

◆ 人民邮电出版社出版发行　北京市崇文区夕照寺街14号
邮编　100061　电子邮件　315@ptpress.com.cn
网址　http://www.ptpress.com.cn
三河市海波印务有限公司印刷

◆ 开本：800×1000　1/16
印张：25.5　彩插：2
字数：602千字　2013年1月第1版
印数：1－4 000册　2013年1月河北第1次印刷

著作权合同登记号　图字：01-2011-7806号

ISBN 978-7-115-29990-1

定价：79.00元

读者服务热线：(010)51095186转604　印装质量热线：(010)67129223

反盗版热线：(010)67171154

关于本书

如果你翻开了本书，那么很有可能是因为要做一些数据的收集、总结、转换、探索、建模、可视化或呈现方面的工作。如果确实如此，那么R完全能够满足你的需求！R已经成了统计、预测分析和数据可视化的全球通用语言。它提供各种用于分析和理解数据的方法，从最基础的到最前沿的，无所不包。

R是一个开源项目，在很多操作系统上都可以免费得到，包括Windows、Mac OS X和Linux。R还在持续发展中，每天都在纳入新的功能。此外，R还得到了社区的广泛支持，这个社区里既有数据科学家也有程序员，他们很乐于为R的用户提供帮助或建议。

R以能创建漂亮优雅的图形而闻名，但实际上它可以处理各种统计问题。基本的安装就提供了数以百计的数据管理、统计和图形函数。不过，R很多强大的功能都来自社区开发的数以千计的扩展（包）。

但这些好处都是有代价的。对于新手来说，经常遇到的两个基本难题就是：R到底是什么以及R究竟能做什么？甚至是经验丰富的R用户也常常发现一些他们之前闻所未闻的新功能。

本书是一本R指南，高度概括了该软件和它的强大功能。本书会介绍基本安装中最重要的函数，以及90多个重要扩展包中的函数。整本书都是围绕实际应用展开的，你将学会理解数据并能够与他人交流这种对数据的理解。通读本书，你应该会对R的原理和功能有基本的了解，并知道从什么地方学习更多的相关知识。你将能用各种技术实现数据的可视化，还能解决各种难度的数据分析问题。

读者对象

每一个要处理数据的人都应该读读本书，他们不需要任何统计编程或R语言知识背景。R语言新手完全能够读懂本书，而有经验的R老手也能在本书中发现很多实用的新东西。

没有统计背景，但需要用R操作数据、总结数据、绘制图形的读者会觉得第1章～第6章、第11章和第16章比较容易理解。第7章和第10章则需要读者学过一学期的统计学课程；第8章、第9章和第12章～第15章则需要读者学过一学年的统计学课程。不过，我尽可能地让每一章都能同时迎合数据分析新手和专家的需求，让所有人都能从中获益。

本书结构

本书的目的是让读者熟悉R平台，重点关注那些能马上应用到数据操作、可视化和理解的方法。全书共16章，分为4部分："入门"、"基础方法"、"中级方法"和"高级方法"。在8个附录中还有更多的相关内容。

第1章首先简要介绍了R，以及它作为数据分析平台的诸多特性。这一章主要介绍了R的获取，以及如何用网上的扩展包增强R基本安装的功能。另外，它还介绍了用户界面，以及如何以交互方式和批处理方式运行程序。

第2章介绍了向R中导入数据的诸多方法。这一章的前半部分介绍了R用来存储数据的数据结构，以及如何用键盘输入数据。后半部分介绍了怎样从文本文件、网页、电子表格、统计软件和数据库向R导入数据。

很多用户最初接触R都是为了绘制图形，我们在第3章会对此作介绍。这一章介绍了创建、修改图形的方法，以及如何将图形保存为各种格式的文件。

第4章探讨了基本的数据管理，包括数据集的排序、合并、取子集，以及变量的转换、重编码和删除。

在第4章的基础上，第5章涵盖了数据管理中函数（数学函数、统计函数、字符函数）和控制结构（循环、条件执行）的用法。然后我们介绍如何编写自己的R函数，以及如何用不同的方法整合数据。

第6章演示了创建常见单变量图形的方法，例如柱状图、饼图、直方图、密度图、箱线图和点图。这些图形对于理解单变量的分布都很有用。

第7章首先演示了如何总结数据，包括使用描述统计量和交叉表。然后，这一章介绍了用于分析两变量间关系的基本方法，包括相关性、t检验、卡方检验和非参数方法。

第8章介绍了针对一个数值型结果变量与一系列数值型预测变量间的关系进行建模的回归方法，详细给出了拟合模型的方法、适用性评价和含义解释。

第9章介绍了基于方差及其变体对基本实验设计的分析。此处，我们通常感兴趣的是处理方式的组合或条件对数值结果变量的影响。这一章还介绍了如何评价分析的适用性，以及如何可视化地展示分析结果。

第10章详细介绍了功效分析。这一章首先讨论了假设检验，重点是如何判断在给定置信度的前提下需要多少样本才能判断处理的效果。这可以帮助我们安排实验和准实验研究来获得有用的结果。

第11章扩展了第5章的内容，介绍了创建表现两个或多个变量间关系的图形。这包括各种2D和3D的散点图、散点图矩阵、折线图、相关图和马赛克图。

第12章介绍了一些稳健的数据分析方法，它们能处理比较复杂的情况，比如数据来源于未知或混合分布、有小样本问题、有恼人的异常值，或者依据理论分布设计假设检验非常复杂且在数学上难以处理的情况。这一章介绍的方法包括重抽样和自助法——很容易在R中实现的需要大量计算机资源的方法。

第13章扩展了第8章中介绍的回归方法，分析非正态分布的数据。这一章首先介绍了广义线性模型，然后重点介绍了如何预测类别型变量（Logistic回归）或计数变量（泊松回归）。

多元数据分析的一个难点是简化数据。第14章介绍了如何将大量的相关变量转换成较少的不相关变量（主成分分析），以及如何发现一系列变量中的潜在结构（因子分析）。这些方法涉及许多步骤，每一步都有详细的介绍。

实际工作中面临的一个普遍问题是数据值缺失，第15章介绍了一个应对此问题的现代方法。R中有很多简捷的方法可以用来分析因各种原因导致缺失而生成的不完整数据。这一章对一些好的方法都有介绍，还具体说明了在什么情况下应该用哪一种以及应该避免使用哪些方法。

第16章介绍了R中最先进、最有用的数据可视化方法，包括用lattice图形表现非常复杂的数据，简要介绍新的`ggplot2`包，并对各种跟图形实时交互的方法做了综述。

后记中介绍了一些优秀的网站，有助于读者进一步学习R、加入R社区、获得帮助，并及时获得R这个快速发展的软件的最新信息。

最后的内容也很重要，8个附录（从A到H）扩展了正文的一些内容，包括R中的图形用户界面、自定义和升级R、导出数据到其他软件、创建出版级质量的输出、（像MATLAB一样）用R做矩阵计算，以及处理大型数据集。

例子

为了让本书内容尽可能接近各个领域的实际情况，我从心理学、社会学、医学、生物、商业和工程等诸多领域选取了一些例子。所有的这些例子都不需要读者具备这些领域的专业知识。

这些例子中所使用的数据集是经过精心挑选的，因为它们不仅提出了有趣的问题，而且比较小。这样能让读者专注于技术，快速地理解所涉及的过程。在学习新方法时，数据集小是有好处的。

这些数据集有些是R基本安装中就有的，有些则可以通过网上下载软件包来获得。每个例子的代码都可以从www.manning.com/RinAction[①]下载。为了更好地理解本书中的内容，我建议读者在阅读本书时试试这些例子。

经常听人引用这么一句话：如果你问两个统计学家该如何分析一个数据集，你会得到三个答案。反过来说，每个答案都能让你更好地理解数据集。对于一个问题，我不会说某种分析方式是最好的，或者是唯一的。读者应该用本书中学到的技术动手分析数据，看看都能得到什么。R是交互式的，最好的学习方法就是自己尝试。

排版约定

下面是本书的排版约定。

- 等宽字体用于代码清单。

① 也可在图灵社区（www.ituring.com.cn）本书网页免费注册下载。——编者注

- 等宽字体还用于在一般的正文中表示代码或之前定义的对象。
- 代码清单中的斜体表示占位符。你应该用自己问题中的文本和值来替换它们。例如，*path_to_my_file*就应该用该文件在你自己电脑上的实际路径来替换。
- R是一种交互式语言，用提示符（默认是>）表示已经准备好读取用户的下一行输入。本书中的很多代码清单都是从交互式会话中截取的。当你看到代码是以>开头时，不要输入这个提示符。
- 用行内注释作为代码注释（这是Manning图书的传统做法）。此外，有些注释会以有序项目符号的形式出现（如❶），它们对应稍后正文中对代码作出的解释。
- 为了节约版面，让正文更紧凑，我们会在交互式会话的输出中加入一些空白，同时也会删除一些与当前讨论问题无关的文字。

作者在线

在购买本书英文版的同时，你便获得了访问Manning出版社运营的私密Web论坛的权限，在这里你可以发表图书评论、询问技术问题，还可以从作者或其他读者那里获得帮助。用浏览器访问www.manning.com/RinAction就可以访问和订阅这个论坛。这个网页说明了注册后如何访问论坛、能获得何种帮助以及论坛上的行为规范等信息。

Manning致力于为读者之间以及读者和作者之间提供一个良好的交流空间。作者对论坛的参与完全是自愿的，他们对AO论坛的贡献都是（无偿的）志愿行为。我们建议读者向作者提一些有挑战性的问题，作者对这样的问题会更有兴趣。

在本书英文版的整个销售期中，大家都可以从出版商的网站上访问AO论坛，阅读以前的讨论。

关于封面图片

本书的封面图片标题是“来自扎达尔的男人”。这张图片取自19世纪中期Nikola Arsenovic的一本克罗地亚传统服饰图集的复刻版，由克罗地亚斯普利特的Ethnographic博物馆在2003年时出版。图片由Ethnographic博物馆一位热心的图书管理员提供。斯普利特在中世纪时是罗马帝国的核心，从大概公元304年起，卸任的帝国国王戴克里安（Diocletian）所居住的皇宫就在这里。这本书中涵盖了克罗地亚各个地区色彩斑斓的图片，并对服饰和日常生活做了介绍。

扎达尔（Zadar）是克罗地亚达尔马提亚（Dalmatian）海岸北方的一个古罗马时期的城镇，有着两千年的历史，曾在数百年的时间里是康斯坦丁堡和西方的贸易通道上的重要港口。它坐落于一个伸向亚得里亚海的半岛上，周围被各种大大小小的岛屿环绕，如画般的风景，加上罗马帝国时代的遗迹、护城河和古老的石头城墙，让这里成为了旅行者的圣地。封面图片上的人穿着蓝色的羊毛裤子和白色的麻质衬衫，外披点缀着当地特色刺绣的蓝色马甲和夹克，再加上红色羊毛腰带和帽子，就构成了一套完整的服饰。

在这过去的二百年里，服饰和生活方式都发生了巨大的变化，各地当时的特色已随时间流逝。现如今，来自不同大陆的人都已难以区分，更不用说相隔仅数英里的村子和城镇居民了。或许，文化多样性也是我们为获得丰富多彩的个人生活而付出的代价——现在生活无疑是更多姿多彩的快节奏的高科技生活。

Manning出版社用两个世纪前各地独具特色的生活方式来赞美计算机行业的诞生和发展，用古老书籍和图册中的图片让我们领略那个时代的风土人情。

目　录

第一部分　入　门

第 1 章　R 语言介绍……3
1.1　为何要使用 R? ……4
1.2　R 的获取和安装……6
1.3　R 的使用 ……7
1.3.1　新手上路 ……7
1.3.2　获取帮助 ……10
1.3.3　工作空间 ……10
1.3.4　输入和输出 ……12
1.4　包 ……14
1.4.1　什么是包 ……14
1.4.2　包的安装 ……14
1.4.3　包的载入 ……14
1.4.4　包的使用方法……15
1.5　批处理……15
1.6　将输出用为输入——结果的重用 ……16
1.7　处理大数据集 ……16
1.8　示例实践……17
1.9　小结 ……18
第 2 章　创建数据集……19
2.1　数据集的概念 ……19
2.2　数据结构……20
2.2.1　向量……21
2.2.2　矩阵……22
2.2.3　数组……23
2.2.4　数据框 ……24
2.2.5　因子……27
2.2.6　列表……29
2.3　数据的输入……30
2.3.1　使用键盘输入数据……31
2.3.2　从带分隔符的文本文件导入数据……32
2.3.3　导入 Excel 数据 ……33
2.3.4　导入 XML 数据……34
2.3.5　从网页抓取数据……34
2.3.6　导入 SPSS 数据……34
2.3.7　导入 SAS 数据 ……34
2.3.8　导入 Stata 数据 ……35
2.3.9　导入 netCDF 数据……35
2.3.10　导入 HDF5 数据……35
2.3.11　访问数据库管理系统……36
2.3.12　通过 Stat/Transfer 导入数据 ……37
2.4　数据集的标注……37
2.4.1　变量标签 ……38
2.4.2　值标签……38
2.5　处理数据对象的实用函数……38
2.6　小结 ……39
第 3 章　图形初阶……40
3.1　使用图形……40
3.2　一个简单的例子 ……42
3.3　图形参数……43
3.3.1　符号和线条 ……45
3.3.2　颜色……46
3.3.3　文本属性……47
3.3.4　图形尺寸与边界尺寸 ……49
3.4　添加文本、自定义坐标轴和图例 ……50
3.4.1　标题……51
3.4.2　坐标轴……52
3.4.3　参考线……54

3.4.4 图例……54
3.4.5 文本标注……56
3.5 图形的组合……58
3.6 小结……64

第4章 基本数据管理……65

4.1 一个示例……65
4.2 创建新变量……67
4.3 变量的重编码……68
4.4 变量的重命名……69
4.5 缺失值……70
4.5.1 重编码某些值为缺失值……71
4.5.2 在分析中排除缺失值……72
4.6 日期值……73
4.6.1 将日期转换为字符型变量……74
4.6.2 更进一步……74
4.7 类型转换……74
4.8 数据排序……75
4.9 数据集的合并……76
4.9.1 添加列……76
4.9.2 添加行……76
4.10 数据集取子集……77
4.10.1 选入（保留）变量……77
4.10.2 剔除（丢弃）变量……77
4.10.3 选入观测……78
4.10.4 subset()函数……79
4.10.5 随机抽样……79
4.11 使用SQL语句操作数据框……80
4.12 小结……81

第5章 高级数据管理……82

5.1 一个数据处理难题……82
5.2 数值和字符处理函数……83
5.2.1 数学函数……83
5.2.2 统计函数……84
5.2.3 概率函数……86
5.2.4 字符处理函数……89
5.2.5 其他实用函数……90
5.2.6 将函数应用于矩阵和数据框……91
5.3 数据处理难题的一套解决方案……93
5.4 控制流……96
5.4.1 重复和循环……97
5.4.2 条件执行……97
5.5 用户自编函数……99
5.6 整合与重构……101
5.6.1 转置……101
5.6.2 整合数据……101
5.6.3 reshape包……102
5.7 小结……105

第二部分 基本方法

第6章 基本图形……108

6.1 条形图……108
6.1.1 简单的条形图……109
6.1.2 堆砌条形图和分组条形图……110
6.1.3 均值条形图……111
6.1.4 条形图的微调……112
6.1.5 棘状图……113
6.2 饼图……114
6.3 直方图……116
6.4 核密度图……118
6.5 箱线图……120
6.5.1 使用并列箱线图进行跨组比较……121
6.5.2 小提琴图……124
6.6 点图……125
6.7 小结……128

第7章 基本统计分析……129

7.1 描述性统计分析……130
7.1.1 方法云集……130
7.1.2 分组计算描述性统计量……133
7.1.3 结果的可视化……136
7.2 频数表和列联表……136
7.2.1 生成频数表……137
7.2.2 独立性检验……142
7.2.3 相关性的度量……144
7.2.4 结果的可视化……144

7.2.5 将表转换为扁平格式……144
7.3 相关……146
7.3.1 相关的类型……146
7.3.2 相关性的显著性检验……148
7.3.3 相关关系的可视化……150
7.4 t检验……150
7.4.1 独立样本的t检验……150
7.4.2 非独立样本的t检验……151
7.4.3 多于两组的情况……152
7.5 组间差异的非参数检验……152
7.5.1 两组的比较……152
7.5.2 多于两组的比较……153
7.6 组间差异的可视化……155
7.7 小结……155

第三部分　中级方法

第8章　回归……158
8.1 回归的多面性……159
8.1.1 OLS回归的适用情境……159
8.1.2 基础回顾……160
8.2 OLS回归……160
8.2.1 用lm()拟合回归模型……161
8.2.2 简单线性回归……162
8.2.3 多项式回归……164
8.2.4 多元线性回归……167
8.2.5 有交互项的多元线性回归……169
8.3 回归诊断……171
8.3.1 标准方法……171
8.3.2 改进的方法……175
8.3.3 线性模型假设的综合验证……180
8.3.4 多重共线性……181
8.4 异常观测值……181
8.4.1 离群点……182
8.4.2 高杠杆值点……182
8.4.3 强影响点……183
8.5 改进措施……186
8.5.1 删除观测点……186
8.5.2 变量变换……186
8.5.3 增删变量……187
8.5.4 尝试其他方法……188
8.6 选择“最佳”的回归模型……188
8.6.1 模型比较……188
8.6.2 变量选择……189
8.7 深层次分析……193
8.7.1 交叉验证……193
8.7.2 相对重要性……194
8.8 小结……197
第9章　方差分析……198
9.1 术语速成……198
9.2 ANOVA模型拟合……201
9.2.1 aov()函数……201
9.2.2 表达式中各项的顺序……201
9.3 单因素方差分析……202
9.3.1 多重比较……204
9.3.2 评估检验的假设条件……206
9.4 单因素协方差分析……208
9.4.1 评估检验的假设条件……209
9.4.2 结果可视化……210
9.5 双因素方差分析……211
9.6 重复测量方差分析……214
9.7 多元方差分析……216
9.7.1 评估假设检验……217
9.7.2 稳健多元方差分析……219
9.8 用回归来做ANOVA……219
9.9 小结……221
第10章　功效分析……222
10.1 假设检验速览……222
10.2 用pwr包做功效分析……225
10.2.1 t检验……225
10.2.2 方差分析……227
10.2.3 相关性……227
10.2.4 线性模型……228
10.2.5 比例检验……229
10.2.6 卡方检验……229
10.2.7 在新情况中选择合适的效应值……230
10.3 绘制功效分析图形……232

10.4 其他软件包……234
10.5 小结……235

第 11 章 中级绘图……236

11.1 散点图……237
11.1.1 散点图矩阵……239
11.1.2 高密度散点图……244
11.1.3 三维散点图……247
11.1.4 气泡图……250
11.2 折线图……252
11.3 相关图……255
11.4 马赛克图……259
11.5 小结……261

第 12 章 重抽样与自助法……263

12.1 置换检验……263
12.2 用 coin 包做置换检验……265
12.2.1 独立两样本和 K 样本检验……266
12.2.2 列联表中的独立性……267
12.2.3 数值变量间的独立性……268
12.2.4 两样本和 K 样本相关性检验……268
12.2.5 深入探究……269
12.3 lmPerm 包的置换检验……269
12.3.1 简单回归和多项式回归……269
12.3.2 多元回归……271
12.3.3 单因素方差分析和协方差分析……271
12.3.4 双因素方差分析……272
12.4 置换检验点评……273
12.5 自助法……273
12.6 boot 包中的自助法……274
12.6.1 对单个统计量使用自助法……275
12.6.2 多个统计量的自助法……277
12.7 小结……279

第四部分 高级方法

第 13 章 广义线性模型……282

13.1 广义线性模型和 glm()函数……282
13.1.1 glm()函数……283
13.1.2 连用的函数……284
13.1.3 模型拟合和回归诊断……285
13.2 Logistic 回归……285
13.2.1 解释模型参数……288
13.2.2 评价预测变量对结果概率的影响……289
13.2.3 过度离势……290
13.2.4 扩展……291
13.3 泊松回归……291
13.3.1 解释模型参数……293
13.3.2 过度离势……294
13.3.3 扩展……295
13.4 小结……297

第 14 章 主成分和因子分析……298

14.1 R 中的主成分和因子分析……299
14.2 主成分分析……300
14.2.1 判断主成分的个数……300
14.2.2 提取主成分……302
14.2.3 主成分旋转……305
14.2.4 获取主成分得分……306
14.3 探索性因子分析……307
14.3.1 判断需提取的公共因子数……308
14.3.2 提取公共因子……309
14.3.3 因子旋转……310
14.3.4 因子得分……313
14.3.5 其他与 EFA 相关的包……313
14.4 其他潜变量模型……314
14.5 小结……314

第 15 章 处理缺失数据的高级方法……316

15.1 处理缺失值的步骤……317
15.2 识别缺失值……318
15.3 探索缺失值模式……319
15.3.1 列表显示缺失值……319
15.3.2 图形探究缺失数据……320
15.3.3 用相关性探索缺失值……322
15.4 理解缺失数据的来由和影响……324
15.5 理性处理不完整数据……325

15.6 完整实例分析（行删除）……326
15.7 多重插补……327
15.8 处理缺失值的其他方法……331
15.8.1 成对删除……331
15.8.2 简单（非随机）插补……332
15.9 小结……332

第16章 高级图形进阶……333

16.1 R中的四种图形系统……333
16.2 lattice包……334
16.2.1 条件变量……338
16.2.2 面板函数……339
16.2.3 分组变量……342
16.2.4 图形参数……345
16.2.5 页面摆放……346
16.3 ggplot2包……347
16.4 交互式图形……351
16.4.1 与图形交互：鉴别点……351
16.4.2 playwith……352
16.4.3 latticist……353
16.4.4 iplots包的交互图形……354
16.4.5 rggobi……355
16.5 小结……356

后记：探索R的世界……357

附录A 图形用户界面……359

附录B 自定义启动环境……362

附录C 从R中导出数据……364

附录D 制作出版级品质的输出……366

附录E R中的矩阵运算……374

附录F 本书中用到的扩展包……376

附录G 处理大数据……381

附录H 更新R……383

参考文献……385

Part 1 第一部分

入　门

欢迎阅读本书！R 是现今最受欢迎的数据分析和可视化平台之一。它是自由的开源软件，并同时提供 Windows、Mac OS X 和 Linux 系统的版本。通读本书，你将掌握精通这个功能全面的软件所需的技能，有效地使用它分析自己的数据。

本书共分四部分。第一部分涵盖了软件的安装、软件界面的操作、数据的导入，以及如何将数据修改成可供进一步分析的格式等基本知识。

第一章将带你熟悉 R 环境。这一章首先是 R 的概览，介绍使其成为强大的现代数据分析平台的独有特性。在简要介绍了如何获取和安装 R 之后，我们通过一系列的简单示例探索了 R 的用户界面。接着，你将学习如何通过可从在线仓库中免费下载的扩展（称为用户贡献包）来增强基本安装的功能。最后，本章以一个示例结尾，让你自测学到的新技术。

熟悉了 R 的界面之后，下一个挑战是将数据导入到程序中。在当今这个信息丰富的世界中，数据的来源和格式多种多样。第 2 章全面介绍向 R 中导入数据的多种方式。此章的前半部分介绍了 R 用以存储数据的各种数据结构，并描述了如何手工输入数据。后半部分讨论了从文本文件、网页、电子表格、统计软件和数据库导入数据的方法。

从工作流程的观点考虑，下一步理应讨论数据管理和数据清理问题。然而，许多第一次接触 R 的用户都对其强大的图形功能表现出了浓厚的兴趣。为了不扫你的兴，第 3 章我们直接开始探索图形的绘制问题。这一章对创建图形、自定义图形、以各种格式保存图形的方法进行了综述，描述了如何设定图形中使用的颜色、符号、线条类型、字体、坐标轴、标题、标签以及图例，最后还介绍了将多个图形组合为单个图形的方法。

尝试过 R 的图形功能之后，我们再重返数据分析的正题。由于数据很少以直接可用的格式出现，因此在开始解决感兴趣的问题之前，我们经常不得不将大量时间花在从不同的数据源组合数据、清理脏数据（误编码的数据、不匹配的数据、含缺失值的数据），以及新变量（组合后的变量、变换后的变量、重编码的变量）的创建上。第 4 章讲述了 R 中基本的数据管理任务，包括数据集的排序、合并、取子集，以及变量的变换、重编码和删除。

第 5 章在第 4 章的基础上，进一步讲解了数据管理中数值（算术运算、三角运算和统计运算）函数和字符处理（字符串取子集、连接和替换）函数的使用。为了阐明许多相关函数的用法，整章使用了一个综合示例进行讲解。接下来是关于控制结构（循环、条件执行）的讨论，你将学到如何编写 R 函数。编写自定义函数能够让你将许多程序执行步骤封装在单个的函数中进行灵活调用，这大大拓展了 R 的功能。因为数据的重塑和整合对于为进一步分析而准备数据的阶段通常很有用，所以最后将讨论一些重组（重塑）数据和整合数据的强大方法。

学习完第一部分之后，你将完全熟悉 R 环境的编程，并可掌握输入和访问数据、清理数据，以及为进一步分析做数据准备所需的技术。另外，你还会获得创建、自定义和保存多种图形的经验。

第1章 R语言介绍

本章内容

- R的安装
- 熟悉R语言
- 运行R程序

我们分析数据的方式在近年来发生了令人瞩目的变化。随着个人电脑和互联网的出现，可获取的数据量有了非常可观的增长。商业公司拥有TB级的客户交易数据，政府、学术团体以及私立研究机构同样拥有各类研究课题的大量档案和调查数据。从这些海量数据中收集信息（更不用说发现规律）已经成为了一项产业。同时，如何以容易让人理解和消化的方式呈现这些信息也日益富有挑战性。

数据分析科学（统计学、计量心理学、计量经济学、机器学习）的发展一直与数据的爆炸式增长保持同步。远在个人电脑和互联网发端之前，学术研究人员就已经开发出了很多新的统计方法，并将其研究成果以论文的形式发表在专业期刊上。这些方法可能需要很多年才能够被程序员改写并整合到广泛用于数据分析的统计软件中。而如今，新的方法层出不穷。统计研究者经常在人们常访问的网站上发表新方法和改进的方法，并附上相应的实现代码。

个人电脑的出现还对我们分析数据的方式产生了另外一种影响。当数据分析需要在大型机上完成的时候，机时非常宝贵难求。分析师们会小心地设定可能用到的所有参数和选项，再让计算机执行计算。程序运行完毕后，输出的结果可能长达几十甚至几百页。之后，分析师会仔细筛查整个输出，去芜存菁。许多受欢迎的统计软件正是在这个时期开发出来的。直到现在，统计软件依然在一定程度上沿袭了这种处理方式。

随着个人电脑将计算变得廉价且便捷，现代数据分析的方式发生了变化。与过去一次性设置好完整的数据分析过程不同，现在这个过程已经变得高度交互化，每一阶段的输出都可以充当下一阶段的输入。一个典型的数据分析过程的示例见图1-1。在任何时刻，这个循环都可能在进行着数据变换、缺失值插补、变量增加或删除，甚至重新执行整个过程。当分析师认为他已经深入地理解了数据，并且可以回答所有能够回答的相关问题时，这个过程即告结束。

个人电脑的出现（特别是高分辨率显示器的普及）同样对理解和呈现分析结果产生了重大影响。一图胜千言，绝对如此！人类非常擅长通过视觉获取有用信息。现代数据分析也日益依赖通

过呈现图形来揭示含义和表达结果。

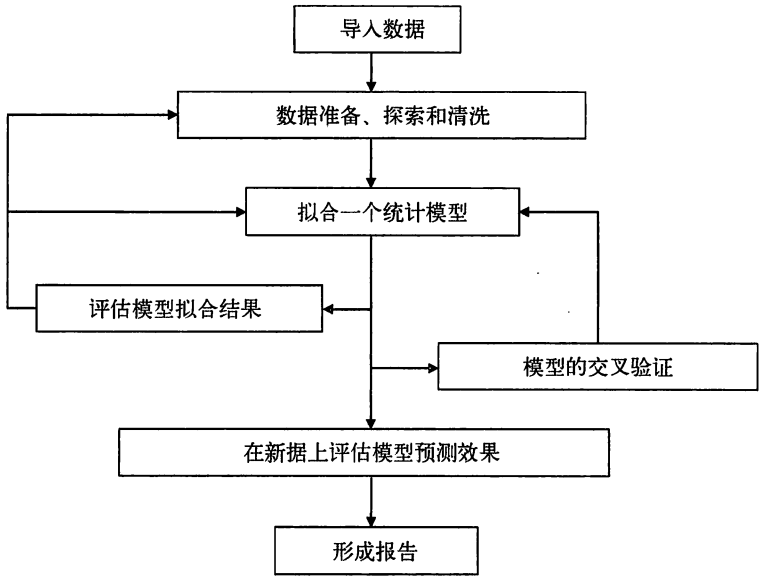


图1-1　典型的数据分析步骤

总而言之，今天的数据分析人士需要从广泛的数据源（数据库管理系统、文本文件、统计软件以及电子表格）获取数据、将数据片段融合到一起、对数据做清理和标注、用最新的方法进行分析、以有意义有吸引力的图形化方式展示结果，最后将结果整合成令人感兴趣的报告并向利益相关者和公众发布。通过下面的介绍你会看到，R正是一个适合完成以上目标的理想而又功能全面的软件。

1.1　为何要使用 R?

与起源于贝尔实验室的S语言类似，R也是一种为统计计算和绘图而生的语言和环境，它是一套开源的数据分析解决方案，由一个庞大且活跃的全球性研究型社区维护。但是，市面上也有许多其他流行的统计和制图软件，如Microsoft Excel、SAS、IBM SPSS、Stata以及Minitab。为何偏偏要选择R?

R有着非常多值得推荐的特性。

- 多数商业统计软件价格不菲，投入成千上万美元都是可能的。而R是免费的！如果你是一位教师或一名学生，好处显而易见。
- R是一个全面的统计研究平台，提供了各式各样的数据分析技术。几乎任何类型的数据分析工作皆可在R中完成。
- R拥有顶尖水准的制图功能。如果希望复杂数据可视化，那么R拥有最全面且最强大的一系列可用功能。

- R是一个可进行交互式数据分析和探索的强大平台。其核心设计理念就是支持图1-1中所概述的分析方法。举例来说，任意一个分析步骤的结果均可被轻松保存、操作，并作为进一步分析的输入。
- 从多个数据源获取并将数据转化为可用的形式，可能是一个富有挑战性的议题。R可以轻松地从各种类型的数据源导入数据，包括文本文件、数据库管理系统、统计软件，乃至专门的数据仓库。它同样可以将数据输出并写入到这些系统中。
- R是一个无与伦比的平台，在其上可使用一种简单而直接的方式编写新的统计方法。它易于扩展，并为快速编程实现新方法提供了一套十分自然的语言。
- R囊括了在其他软件中尚不可用的、先进的统计计算例程。事实上，新方法的更新速度是以周来计算的。如果你是一位SAS用户，想象一下每隔几天就获得一个新SAS过程的情景。
- 如果你不想学习一门新的语言，有各式各样的GUI（Graphical User Interface，图形用户界面）工具通过菜单和对话框提供了与R语言同等的功能。
- R可运行于多种平台之上，包括Windows、UNIX和Mac OS X。这基本上意味着它可以运行于你所能拥有的任何计算机上。（本人曾在偶然间看到过在iPhone上安装R的教程，让人佩服，但这也许不是一个好主意。）

图1-2是展示R制图功能的一个示例。使用一行代码做出的这张图，说明了蓝领工作、白领工作和专业工作在收入、受教育程度以及职业声望方面的关系。从专业角度讲，这是一幅使用不同的颜色和符号表示不同分组的散点图矩阵，带有两类拟合曲线（线性回归和局部加权回归）、置信椭圆以及两种对密度的展示（核密度估计和轴须图）。另外，在每个散点图中都自动标出了值最大的离群点。如果这些术语对你来说很陌生也不必担心。我们将在后续各章中陆续谈及它们。这里请暂且相信我，它们真的非常酷。（搞统计的人读到这里时估计已经垂涎三尺了。）

图1-2主要表明了以下几点。

- 受教育程度（education）、收入（income）、职业声望（prestige）呈线性相关。
- 就总体而言，蓝领工作者有着更低的受教育程度、收入和职业声望；反之，专业工作者有着更高的受教育程度、收入和职业声望。白领工作者介于两者之间。
- 有趣的例外是，铁路工程师（RR.engineer）的受教育程度较低，但收入较高，而牧师（minister）的职业声望高，收入却较低。
- 受教育程度和职业声望（较轻微地）呈现双峰分布，高值和低值数据多于中间的数据。

第8章将会进一步讨论这类图形。重要的是，R能够让你以一种简单而直接的方式创建优雅、信息丰富、高度定制化的图形。而使用其他统计语言创建类似的图形不仅费时费力，而且可能根本无法做到。

可惜的是，R的学习曲线较为陡峭。因为它的功能非常丰富，所以文档和帮助文件也相当多。另外，由于许多功能都是由独立贡献者编写的可选模块提供的，这些文档可能比较零散而且很难找到。事实上，要掌握R的所有功能，可以说是一项挑战。

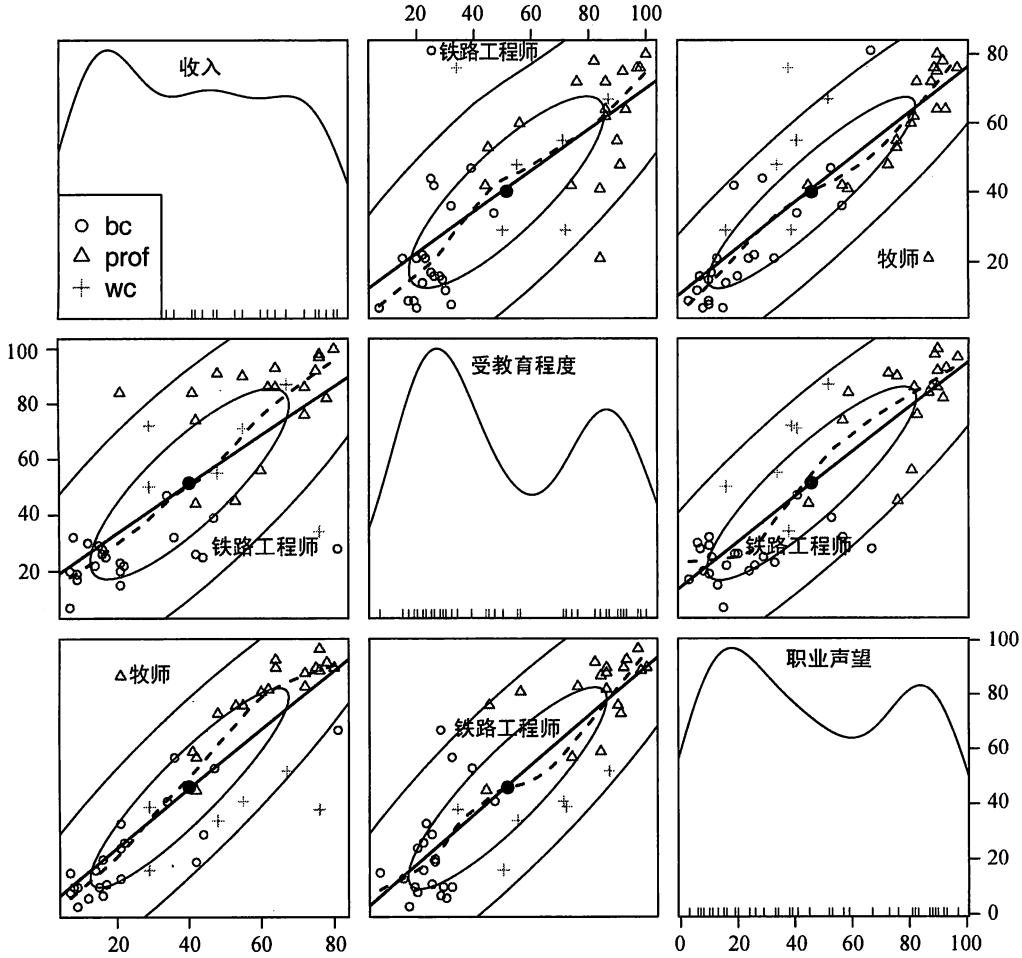


图1-2　蓝领（bc）、白领（wc）、专业工作者（prof）的收入、受教育程度和职业声望之间的关系。资料来源：John Fox编写的car包（函数scatterplot Matrix）。使用其他统计编程语言很难绘制类似的图形，但在R中只需一到两行代码

本书的目标是让读者快速而轻松地学会使用R。我们将遍览R的许多功能，介绍到的内容足以让你开始着手分析数据，并且在需要你深入了解的地方给出参考材料。下面我们从R的安装开始学习。

1.2　R的获取和安装

R可以在CRAN（Comprehensive R Archive Network）http://cran.r-project.org上免费下载。Linux、Mac OS X和Windows都有相应编译好的二进制版本。根据你所选择平台的安装说明进行安装即可。稍后我们将讨论如何通过安装称为包（package）的可选模块（同样可从CRAN下载）来增强

R的功能。附录H描述了如何对R进行版本升级。

1.3 R的使用

R是一种区分大小写的解释型语言。你可以在命令提示符（>）后每次输入并执行一条命令，或者一次性执行写在脚本文件中的一组命令。R中有多种数据类型，包括向量、矩阵、数据框（与数据集类似）以及列表（各种对象的集合）。我们将在第2章中讨论这些数据类型。

R中的多数功能是由程序内置函数和用户自编函数提供的，一次交互式会话期间的所有数据对象都被保存在内存中。一些基本函数是默认直接可用的，而其他高级函数则包含于按需加载的程序包中。

R语句由函数和赋值构成。R使用 <-，而不是传统的 = 作为赋值符号。例如，以下语句：

```
x <- rnorm(5)
```

创建了一个名为x的向量对象，它包含5个来自标准正态分布的随机偏差。

注意 R允许使用=为对象赋值。但是这样写的R程序并不多，因为它不是标准语法，某些情况下，用等号赋值会出现问题，R程序员可能会因此取笑你。你还可以反转赋值方向。例如，`rnorm(5) -> x`与上面的语句等价。重申一下，使用等号赋值的做法并不常见，在本书中不推荐使用。

注释由符号 # 开头。在 # 之后出现的任何文本都会被R解释器忽略。

1.3.1 新手上路

如果你使用的是Windows，从开始菜单中启动R。在Mac上，则需要双击应用程序文件夹中的R图标。对于Linux，在终端窗口中的命令提示符下敲入R并回车。这些方式都可以启动R（R界面参见图1-3）。

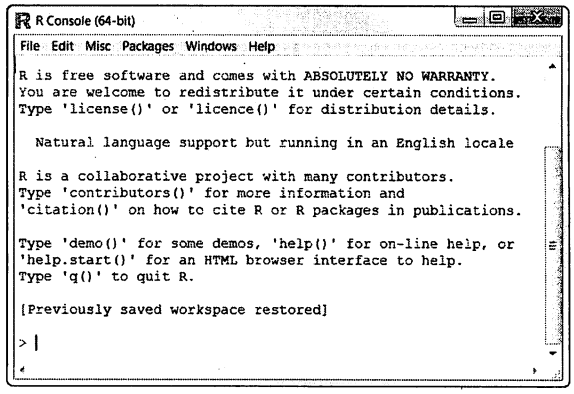


图1-3 Windows中的R界面

让我们通过一个简单的虚构示例来直观地感受一下这个界面。假设我们正在研究生理发育问题，并收集了10名婴儿在出生后一年内的月龄和体重数据（见表1-1）。我们感兴趣的是体重的分布及体重和月龄的关系。

表1-1　10名婴儿的月龄和体重

年龄（月）	体重（kg）	年龄（月）	体重（kg）
01	4.4	09	7.3
03	5.3	03	6.0
05	7.2	09	10.4
02	5.2	12	10.2
11	8.5	03	6.1

*以上为虚构数据。

可以使用函数c()以向量的形式输入月龄和体重数据，此函数可将其参数组合成一个向量或列表。然后用其他函数获得体重的均值和标准差，以及月龄和体重的相关度，最后用图形展示月龄和体重的关系，这样就可以用可视化的方式检查其中可能存在的趋势。如代码清单1-1所示，函数q()将结束会话并允许你退出R。

代码清单1-1　一个R会话示例

```
> age <- c(1,3,5,2,11,9,3,9,12,3)
> weight <- c(4.4,5.3,7.2,5.2,8.5,7.3,6.0,10.4,10.2,6.1)
> mean(weight)
[1] 7.06
> sd(weight)
[1] 2.077498
> cor(age,weight)
[1] 0.9075655
> plot(age,weight)
> q()
```

从代码清单1-1中可以看到，这10名婴儿的平均体重是7.06 kg，标准差为2.08 kg，月龄和体重之间存在较强的线性关系（相关度 = 0.91）。这种关系也可以从图1-4所示的散点图中看到。不出意料，随着月龄的增长，婴儿的体重也趋于增加。

散点图1-4的信息量充足，但略过“功利”，也不够美观。接下来的几章里，我们会讲到如何自定义图形以契合需要。

小提示　若想大致了解R能够作出何种图形，在命令行中运行demo(graphics)即可。生成的部分图形如图1-5所示。其他的演示还有demo(Hershey)、demo(persp)和demo(image)。要看到完整的演示列表，不加参数直接运行demo()即可。

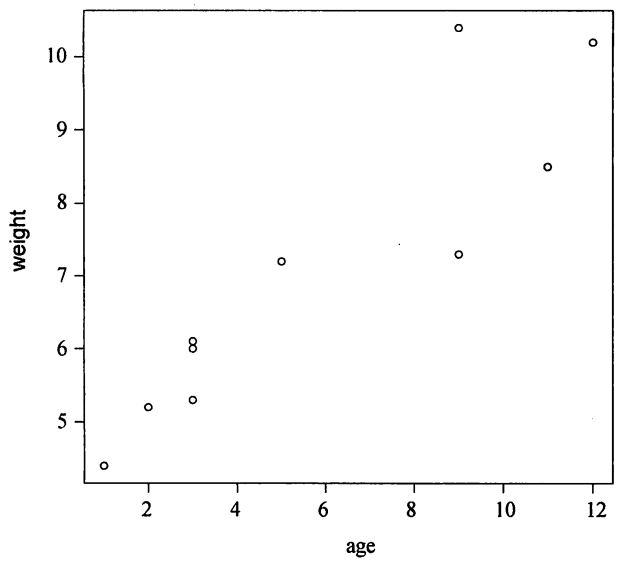


图1-4 婴儿体重（千克）和年龄（月）的散点图

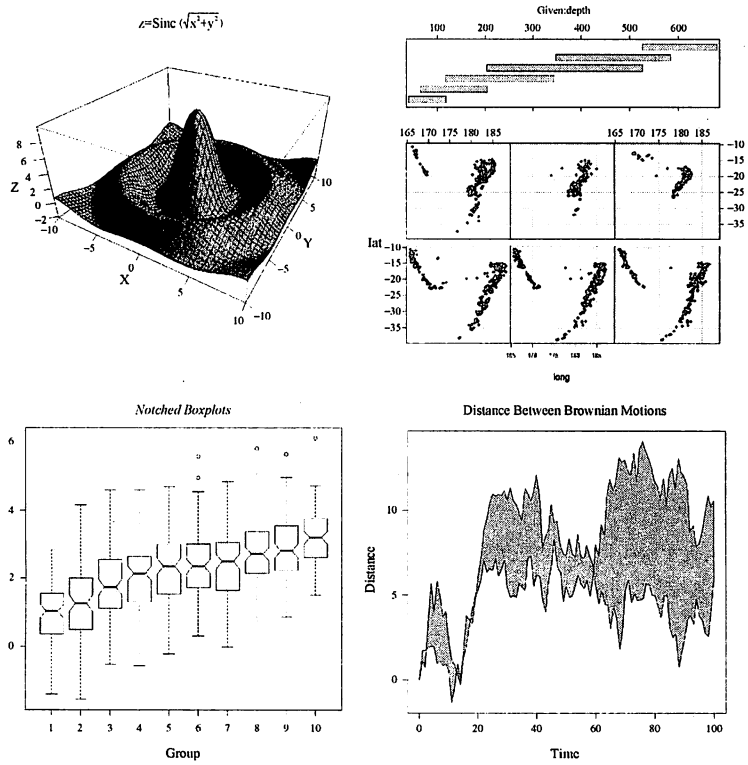


图1-5 函数demo()绘制的图形示例

1.3.2　获取帮助

R提供了大量的帮助功能，学会如何使用这些帮助文档可以在相当程度上助力你的编程工作。R的内置帮助系统提供了当前已安装包中所有函数[①]的细节、参考文献以及使用示例。帮助文档可以通过表1-2中列出的函数进行查看。

表1-2　R中的帮助函数

函　数	功　能
`help.start()`	打开帮助文档首页
`help("foo")`或`?foo`	查看函数`foo`的帮助（引号可以省略）
`help.search("foo")`或`??foo`	以`foo`为关键词搜索本地帮助文档
`example("foo")`	函数`foo`的使用示例（引号可以省略）
`RSiteSearch("foo")`	以`foo`为关键词搜索在线文档和邮件列表存档
`apropos("foo", mode="function")`	列出名称中含有`foo`的所有可用函数
`data()`	列出当前已加载包中所含的所有可用示例数据集
`vignette()`	列出当前已安装包中所有可用的vignette文档
`vignette("foo")`	为主题`foo`显示指定的vignette文档

函数`help.start()`会打开一个浏览器窗口，我们可在其中查看入门和高级的帮助手册、常见问题集，以及参考材料。函数`RSiteSearch()`可在在线帮助手册和R-Help邮件列表的讨论存档中搜索指定主题，并在浏览器中返回结果。由函数`vignette()`函数返回的vignette文档一般是PDF格式的实用介绍性文章。不过，并非所有的包都提供了vignette文档。不难发现，R提供了大量的帮助功能，学会如何使用这些帮助文档，毫无疑问地会有助于编程。我经常会使用`?`来查看某些函数的功能（如选项或返回值）。

1.3.3　工作空间

工作空间（workspace）就是当前R的工作环境，它储存着所有用户定义的对象（向量、矩阵、函数、数据框、列表）。在一个R会话结束时，你可以将当前工作空间保存到一个镜像中，并在下次启动R时自动载入它。各种命令可在R命令行中交互式地输入。使用上下方向键查看已输入命令的历史记录。这样我们就可以选择一个之前输入过的命令并适当修改，最后按回车重新执行它。

当前的工作目录（working directory）是R用来读取文件和保存结果的默认目录。我们可以使用函数`getwd()`来查看当前的工作目录，或使用函数`setwd()`设定当前的工作目录。如果需要读入一个不在当前工作目录下的文件，则需在调用语句中写明完整的路径。记得使用引号闭合这些目录名和文件名。

用于管理工作空间的部分标准命令见表1-3。

① 确切地说，这里的“所有”是指那些已导出的（exported）、对用户可见的函数。——译者注

表1-3 用于管理R工作空间的函数

函 数	功 能
getwd()	显示当前的工作目录
setwd("*mydirectory*")	修改当前的工作目录为*mydirectory*
ls()	列出当前工作空间中的对象
rm(*objectlist*)	移除（删除）一个或多个对象
help(options)	显示可用选项的说明
options()	显示或设置当前选项
history(#)	显示最近使用过的#个命令（默认值为25）
savehistory("*myfile*")	保存命令历史到文件*myfile*中（默认值为.Rhistory）
loadhistory("*myfile*")	载入一个命令历史文件（默认值为.Rhistory）
save.image("*myfile*")	保存工作空间到文件*myfile*中（默认值为.RData）
save(*objectlist*, file="*myfile*")	保存指定对象到一个文件中
load("*myfile*")	读取一个工作空间到当前会话中（默认值为.RData）
q()	退出R。将会询问你是否保存工作空间

要了解这些命令是如何运作的，运行代码清单1-2中的代码并查看结果。

代码清单1-2 用于管理R工作空间的命令使用示例

```
setwd("C:/myprojects/project1")
options()
options(digits=3)
x <- runif(20)
summary(x)
hist(x)
savehistory()
save.image()
q()
```

首先，当前工作目录被设置为C:/myprojects/project1，当前的选项设置情况将显示出来，而数字将被格式化，显示为具有小数点后三位有效数字的格式。然后，我们创建了一个包含20个均匀分布随机变量的向量，生成了此数据的摘要统计量和直方图。最后，命令的历史记录保存到文件.Rhistory中，工作空间（包含向量x）保存到文件.RData中，会话结束。

注意setwd()命令的路径中使用了正斜杠。R将反斜杠（\）作为一个转义符。即使在Windows平台上运行R，在路径中也要使用正斜杠。同时注意，函数setwd()不会自动创建一个不存在的目录。如果必要的话，可以使用函数dir.create()来创建新目录，然后使用setwd()将工作目录指向这个新目录。

在独立的目录中保存项目是一个好主意。我通常会在启动一个R会话时使用setwd()命令指定到某一个项目的路径，后接不加选项的load()命令。这样做可以让我从上一次会话结束的地方重新开始，并保证各个项目之间的数据和设置互不干扰。在Windows和Mac OS X平台上就更简

单了。跳转到项目所在目录并双击保存的镜像文件即可。这样做可以启动R，载入保存的工作空间，并设置当前工作目录到这个文件夹中。

1.3.4　输入和输出

启动R后将默认开始一个交互式的会话，从键盘接受输入并从屏幕进行输出。不过你也可以处理写在一个脚本文件（一个包含了R语句的文件）中的命令集并直接将结果输出到多类目标中。

1. 输入

函数`source("filename")`可在当前会话中执行一个脚本。如果文件名中不包含路径，R将假设此脚本在当前工作目录中。举例来说，`source("myscript.R")`将执行包含在文件myscript.R中的R语句集合。依照惯例，脚本文件以.R作为扩展名，不过这并不是必需的。

2. 文本输出

函数`sink("filename")`将输出重定向到文件*filename*中。默认情况下，如果文件已经存在，则它的内容将被覆盖。使用参数`append=TRUE`可以将文本追加到文件后，而不是覆盖它。参数`split=TRUE`可将输出同时发送到屏幕和输出文件中。不加参数调用命令`sink()`将仅向屏幕返回输出结果。

3. 图形输出

虽然`sink()`可以重定向文本输出，但它对图形输出没有影响。要重定向图形输出，使用表1-4中列出的函数即可。最后使用`dev.off()`将输出返回到终端。

表1-4　用于保存图形输出的函数

函　数	输　出
`pdf("filename.pdf")`	PDF文件
`win.metafile("filename.wmf")`	Windows图元文件
`png("filename.png")`	PBG文件
`jpeg("filename.jpg")`	JPEG文件
`bmp("filename.bmp")`	BMP文件
`postscript("filename.ps")`	PostScript文件

让我们通过一个示例来了解整个流程。假设我们有包含R代码的三个脚本文件script1.R、script2.R和script3.R。执行语句：

```
source("script1.R")
```

将会在当前会话中执行script1.R中的R代码，结果将出现在屏幕上。

如果执行语句：

```
sink("myoutput", append=TRUE, split=TRUE)
pdf("mygraphs.pdf")
source("script2.R")
```

文件script2.R中的R代码将执行，结果也将显示在屏幕上。除此之外，文本输出将被追加到文件

myoutput中，图形输出将保存到文件mygraphs.pdf中。

最后，如果我们执行语句：

```
sink()
dev.off()
source("script3.R")
```

文件script3.R中的R代码将执行，结果将显示在屏幕上。这一次，没有文本或图形输出保存到文件中。整个流程大致如图1-6所示。

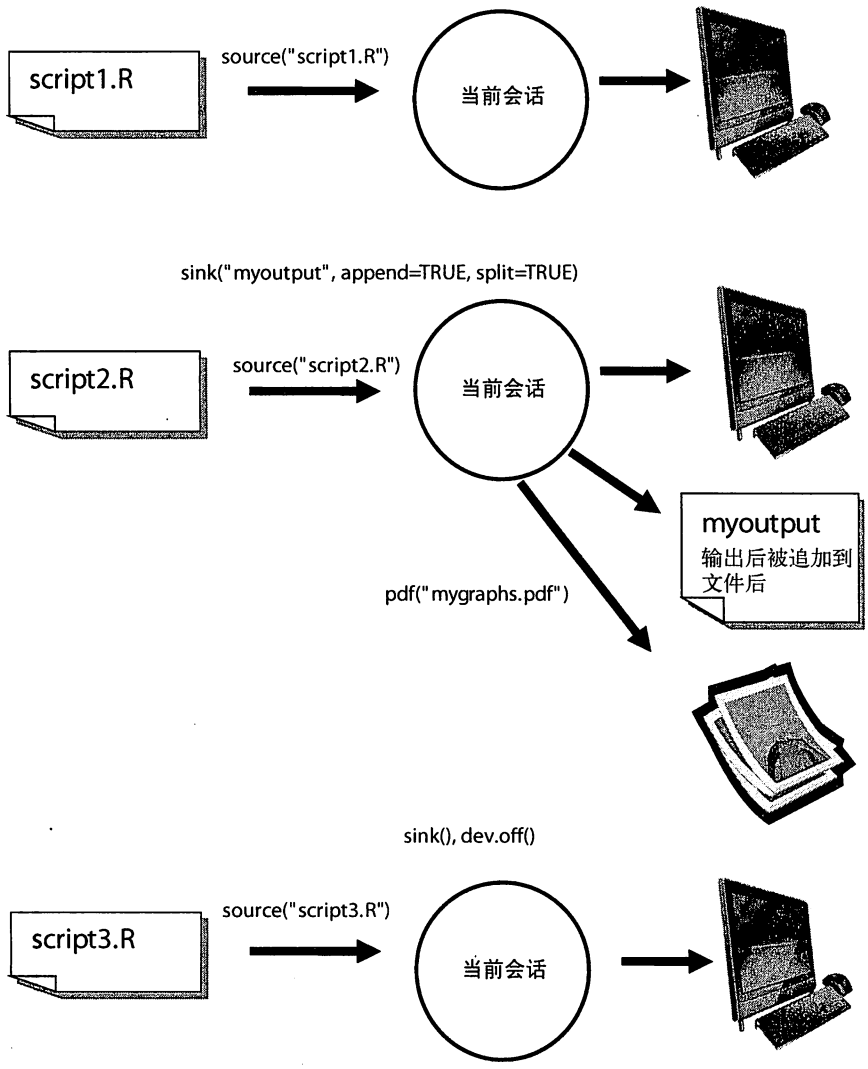


图1-6 使用函数source()进行输入并使用函数sink()进行输出

R对输入来源和输出走向的处理相当灵活，可控性很强。在1.5节中，我们将学习如何在批处

理模式下运行R程序。

1.4 包

R提供了大量开箱即用的功能，但它最激动人心的一部分功能是通过可选模块的下载和安装来实现的。目前有2500多个[①]称为包（package）的用户贡献模块可从http://cran.r-project.org/web/packages下载。这些包提供了横跨各种领域、数量惊人的新功能，包括分析地理数据、处理蛋白质质谱，甚至是心理测验分析的功能。本书中多次使用了这些可选包。

1.4.1 什么是包

包是R函数、数据、预编译代码以一种定义完善的格式组成的集合。计算机上存储包的目录称为库（library）。函数`.libPaths()`能够显示库所在的位置，函数`library()`则可以显示库中有哪些包。

R自带了一系列默认包（包括`base`、`datasets`、`utils`、`grDevices`、`graphics`、`stats`以及`methods`），它们提供了种类繁多的默认函数和数据集。其他包可通过下载来进行安装。安装好以后，它们必须被载入到会话中才能使用。命令`search()`可以告诉你哪些包已加载并可使用。

1.4.2 包的安装

有许多R函数可以用来管理包。第一次安装一个包，使用命令`install.packages()`即可。举例来说，不加参数执行`install.packages()`将显示一个CRAN镜像站点的列表，选择其中一个镜像站点之后，将看到所有可用包的列表，选择其中的一个包即可进行下载和安装。如果知道自己想安装的包的名称，可以直接将包名作为参数提供给这个函数。例如，包`gclus`中提供了创建增强型散点图的函数。可以使用命令`install.packages("gclus")`来下载和安装它。

一个包仅需安装一次。但和其他软件类似，包经常被其作者更新。使用命令`update.packages()`可以更新已经安装的包。要查看已安装包的描述，可以使用`installed.packages()`命令，这将列出安装的包，以及它们的版本号、依赖关系等信息。

1.4.3 包的载入

包的安装是指从某个CRAN镜像站点下载它并将其放入库中的过程。要在R会话中使用它，还需要使用`library()`命令载入这个包。例如，要使用`gclus`包，执行命令`library(gclus)`即可。当然，在载入一个包之前必须已经安装了这个包。在一个会话中，包只需载入一次。如果需要，你可以自定义启动环境以自动载入会频繁使用的那些包。启动环境的自定义在附录B中有详细描述。

---

① 截至本书中文版面世时，已超过4000个。——译者注

1.4.4 包的使用方法

载入一个包之后，就可以使用一系列新的函数和数据集了。包中往往提供了演示性的小型数据集和示例代码，能够让我们尝试这些新功能。帮助系统包含了每个函数的一个描述（同时带有示例），每个数据集的信息也被包括其中。命令help(package="*package_name*")可以输出某个包的简短描述以及包中的函数名称和数据集名称的列表。使用函数help()可以查看其中任意函数或数据集的更多细节。这些信息也能以PDF帮助手册的形式从CRAN下载。

R语言编程中的常见错误

有一些错误是R的初学者和经验丰富的R程序员都可能常犯的。如果程序出错了，请检查以下几方面。

- 使用了错误的大小写。help()、Help()和HELP()是三个不同的函数（只有第一个是正确的）。
- 忘记使用必要的引号。install.packages("gclus")能够正常执行，然而Install.packages(gclus)将会报错。
- 在函数调用时忘记使用括号。例如，要使用help()而非help。即使函数无需参数，仍需加上()。
- 在Windows上，路径名中使用了\。R将反斜杠视为一个转义字符。setwd("c:\mydata")会报错。正确的写法是setwd("c:/mydata")或setwd("c:\\mydata")。
- 使用了一个尚未载入包中的函数。函数order.clusters()包含在包gclus中。如果还没有载入这个包就使用它，将会报错。

R的报错信息可能是含义模糊的，但如果谨慎遵守了以上要点，就应该可以避免许多错误。

1.5 批处理

多数情况下，我们都会交互式地使用R：在提示符后输入命令，接着等待该命令的输出结果。偶尔，我们可能想要以一种重复的、标准化的、无人值守的方式执行某个R程序，例如，你可能需要每个月生成一次相同的报告，这时就可以在R中编写程序，在批处理模式下执行它。

如何以批处理模式运行R与使用的操作系统有关。在Linux或Mac OS X系统下，可以在终端窗口中使用如下命令：

```
R CMD BATCH options infile outfile
```

其中*infile*是包含了要执行的R代码所在文件的文件名，*outfile*是接收输出文件的文件名，*options*部分则列出了控制执行细节的选项。依照惯例，*infile*的扩展名是.R，*outfile*的扩展名为.Rout。

对于Windows，则需使用：

```
"C:\Program Files\R\R-2.13.0\bin\R.exe" CMD BATCH
--vanilla --slave "c:\my projects\myscript.R"
```

将路径调整为R.exe所在的相应位置和脚本文件所在位置。要进一步了解如何调用R，包括命令行选项的使用方法，请参考CRAN（http://cran.r-project.org）上的文档“Introduction to R”[①]。

1.6　将输出用为输入——结果的重用

R的一个非常实用的特点是，分析的输出结果可轻松保存，并作为进一步分析的输入使用。让我们通过一个R中已经预先安装好的数据集作为示例阐明这一点。如果你无法理解这里涉及的统计知识，也别担心，我们在这里关注的只是一般原理。

首先，利用汽车数据mtcars执行一次简单线性回归，通过车身重量（wt）预测每加仑行驶的英里数（mpg）。可以通过以下语句实现：

```
lm(mpg~wt, data=mtcars)
```

结果将显示在屏幕上，不会保存任何信息。

下一步，执行回归，区别是在一个对象中保存结果：

```
lmfit <- lm(mpg~wt, data=mtcars)
```

以上赋值语句创建了一个名为lmfit的列表对象，其中包含了分析的大量信息（包括预测值、残差、回归系数等）。虽然屏幕上没有显示任何输出，但分析结果可在稍后被显示和继续使用。

键入summary(lmfit)将显示分析结果的统计概要，plot(lmfit)将生成回归诊断图形，而语句cook<-cooks.distance(lmfit)将计算影响度量统计量[②]，plot(cook)对其绘图。要在新的车身重量数据上对每加仑行驶的英里数进行预测，不妨使用predict(lmfit, *mynewdata*)。

要了解某个函数的返回值，查阅这个函数在线帮助文档中的“Value”部分即可。本例中应当查阅help(lm)或?lm中的对应部分。这样就可以知道将某个函数的结果赋值到一个对象时，保存下来的结果具体是什么。

1.7　处理大数据集

程序员经常问我R是否可以处理大数据问题。他们往往需要处理来自互联网、气候学、遗传学等研究领域的海量数据。由于R在内存中存储对象，往往会受限于可用的内存量。举例来说，在我服役了5年的2G内存Windows PC上，我可以轻松地处理含有1000万个元素的数据集（100个变量×100 000个观测）。在一台4G内存的iMac上，我通常可以不费力地处理含有上亿元素的数据。

但是也要考虑到两个问题：数据集的大小和要应用的统计方法。R可以处理GB级到TB级的数据分析问题，但需要专门的手段。大数据集的管理和分析问题留待附录G中讨论。

---

① 其中文版文档名为“R导论”。CRAN上的下载地址为http://cran.r-project.org/doc/contrib/Ding-R-intro_cn.pdf。——译者注

② 这里使用了Cook距离作为度量影响的统计量，详见第8章“回归分析”。——译者注

1.8 示例实践

我们将以一个结合了以上各种命令的示例结束本章。以下是任务描述。

(1) 打开帮助文档首页，并查阅其中的“Introduction to R”。

(2) 安装vcd包（一个用于可视化类别数据的包，我们将在第11章中使用）。

(3) 列出此包中可用的函数和数据集。

(4) 载入这个包并阅读数据集Arthritis的描述。

(5) 显示数据集Arthritis的内容（直接输入一个对象的名称将列出它的内容）。

(6) 运行数据集Arthritis自带的示例。如果不理解输出结果，也不要担心。它基本上显示了接受治疗的关节炎患者较接受安慰剂的患者在病情上有了更多改善。

(7) 退出。

所需的代码如代码清单1-3所示，图1-7显示了结果的示例。

代码清单1-3 使用一个新的包

```
help.start()
install.packages("vcd")
help(package="vcd")
library(vcd)
help(Arthritis)
Arthritis
example(Arthritis)
q()
```

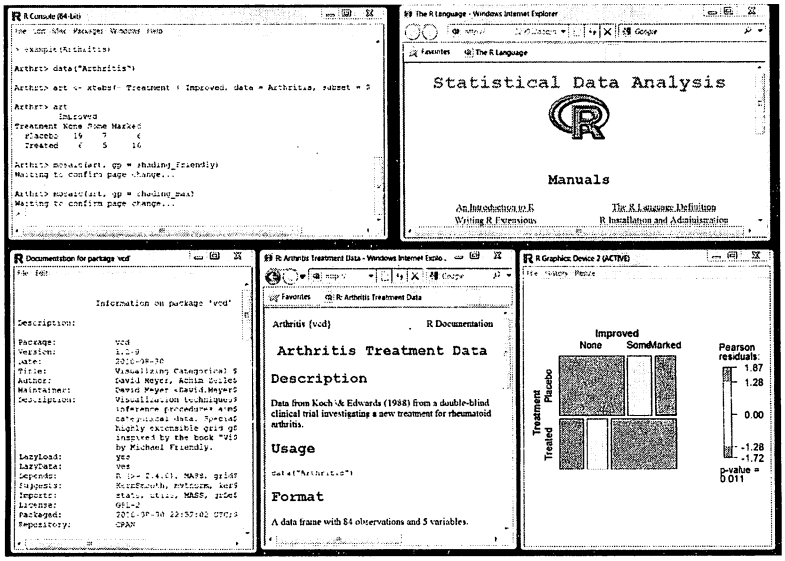


图1-7 代码清单1-3的输出。（从左至右）为关节炎示例的输出结果、帮助文档首页、vcd包的信息、Arthritis数据集的信息，以及一幅展示关节炎治疗情况和治疗结果之间关系的图

如本例所示，我们只需使用少量R代码即可完成大量工作。

1.9　小结

本章中，我们了解了R的一些优点，正是这些优点吸引了学生、研究者、统计学家以及数据分析师等希望理解数据所具有意义的人。我们从程序的安装出发，讨论了如何通过下载附加包来增强R的功能。探索了R的基本界面，以交互和批处理两种方式运行了R程序，并绘制了一些示例图形。还学习了如何将工作保存到文本和图形文件中。由于R的复杂性，我们花了一些时间来了解如何访问大量现成可用的帮助文档。希望你对这个免费软件的强大之处有了一个总体的感觉。

既然已经能够正常运行R，那么是时候把玩你自己的数据了。在下一章中，我们将着眼于R能够处理的各种数据类型，以及如何从文本文件、其他程序和数据库管理系统中导入数据。

第2章 创建数据集

本章内容

- 探索R中的数据结构
- 输入数据
- 导入数据
- 标注数据

按照个人要求的格式来创建含有研究信息的数据集，这是任何数据分析的第一步。在R中，这个任务包括以下两步：

- 选择一种数据结构来存储数据；
- 将数据输入或导入到这个数据结构中。

本章的第一部分（2.1～2.2节）叙述了R中用于存储数据的多种结构。其中，2.2节描述了向量、因子、矩阵、数据框以及列表的用法。熟悉这些数据结构（以及访问其中元素的表述方法）将十分有助于了解R的工作方式，因此你可能需要耐心消化这一节的内容。

本章的第二部分（2.3节）涵盖了多种向R中导入数据的可行方法。可以手工输入数据，亦可从外部源导入数据。数据源可为文本文件、电子表格、统计软件和各类数据库管理系统。举例来说，我在工作中使用的数据往往来自于SQL数据库。偶尔，我也会接受从DOS时代遗留下的数据，或是从现有的SAS和SPSS中导出的数据。通常，你仅仅需要本节中描述的一两种方法，因此根据需求有选择地阅读即可。

创建数据集后，往往需要对它进行标注，也就是为变量和变量代码添加描述性的标签。本章的第三部分（2.4节）将讨论数据集的标注问题，并介绍一些处理数据集的实用函数（2.5节）。下面我们从基本知识讲起。

2.1 数据集的概念

数据集通常是由数据构成的一个矩形数组，行表示观测，列表示变量。表2-1提供了一个假想的病例数据集。

表2-1　病例数据

病人编号（PatientID）	入院时间（AdmDate）	年龄（Age）	糖尿病类型（Diabetes）	病情（Status）
1	10/15/2009	25	Type1	Poor
2	11/01/2009	34	Type2	Improved
3	10/21/2009	28	Type1	Excellent
4	10/28/2009	52	Type1	Poor

不同的行业对于数据集的行和列叫法不同。统计学家称它们为观测（observation）和变量（variable），数据库分析师则称其为记录（record）和字段（field），数据挖掘/机器学习学科的研究者则把它们叫做示例（example）和属性（attribute）。我们在本书中通篇使用术语观测和变量。

你可以清楚地看到此数据集的结构（本例中是一个矩形数组）以及其中包含的内容和数据类型。在表2-1所示的数据集中，PatientID是行/实例标识符，AdmDate是日期型变量，Age是连续型变量，Diabetes是名义型变量，Status是有序型变量。

R中有许多用于存储数据的结构，包括标量、向量、数组、数据框和列表。表2-1实际上对应着R中的一个数据框。多样化的数据结构赋予了R极其灵活的数据处理能力。

R可以处理的数据类型（模式）包括数值型、字符型、逻辑型（TRUE/FALSE）、复数型（虚数）和原生型（字节）。在R中，PatientID、AdmDate和Age将为数值型变量，而Diabetes和Status则为字符型变量。另外，你需要分别告诉R：PatientID是实例标识符，AdmDate含有日期数据，Diabetes和Status分别是名义型和有序型变量。R将实例标识符称为rownames（行名），将类别型（包括名义型和有序型）变量称为因子（factors）。我们会在下一节中讲解这些内容，并在第3章中介绍日期型数据的处理。

2.2　数据结构

R拥有许多用于存储数据的对象类型，包括标量、向量、矩阵、数组、数据框和列表。它们在存储数据的类型、创建方式、结构复杂度，以及用于定位和访问其中个别元素的标记等方面均有所不同。图2-1给出了这些数据结构的一个示意图。

让我们从向量开始，逐个探究每一种数据结构。

一些定义

R中有一些术语较为独特，可能会对新用户造成困扰。

在R中，对象（object）是指可以赋值给变量的任何事物，包括常量、数据结构、函数，甚至图形。对象都拥有某种模式，描述了此对象是如何存储的，以及某个类，像print这样的泛型函数表明如何处理此对象。

与其他标准统计软件（如SAS、SPSS和Stata）中的数据集类似，数据框（data frame）是R中用于存储数据的一种结构：列表示变量，行表示观测。在同一个数据框中可以存储不同类型（如数值型、字符型）的变量。数据框将是你用来存储数据集的主要数据结构。

因子（factor）是名义型变量或有序型变量。它们在R中被特殊地存储和处理。你将在2.2.5节中学习因子的处理。

其他多数术语你应该比较熟悉了，它们基本都遵循统计和计算中术语的定义。

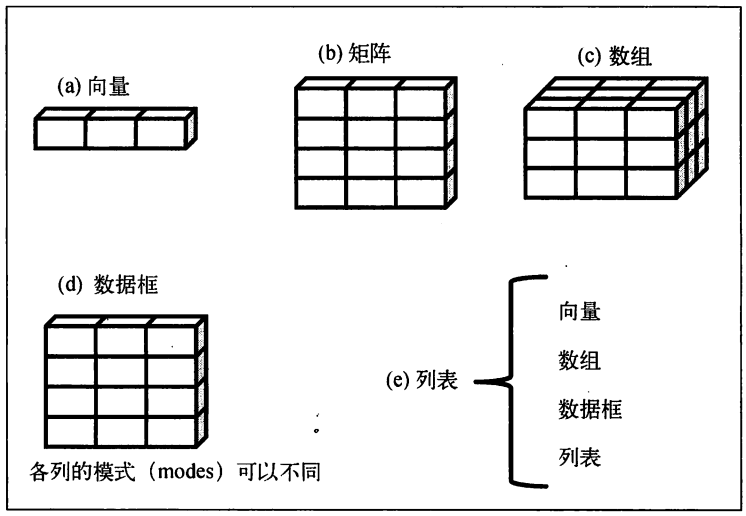


图2-1 R中的数据结构

2.2.1 向量

向量是用于存储数值型、字符型或逻辑型数据的一维数组。执行组合功能的函数c()可用来创建向量。各类向量如下例所示：

```
a <- c(1, 2, 5, 3, 6, -2, 4)
b <- c("one", "two", "three")
c <- c(TRUE, TRUE, TRUE, FALSE, TRUE, FALSE)
```

这里，a是数值型向量，b是字符型向量，而c是逻辑型向量。[1]注意，单个向量中的数据必须拥有相同的类型或模式（数值型、字符型或逻辑型）。同一向量中无法混杂不同模式的数据。

注意 标量是只含一个元素的向量，例如f <- 3、g <- "US"和h <- TRUE。它们用于保存常量。

通过在方括号中给定元素所处位置的数值，我们可以访问向量中的元素。例如，a[c(2, 4)]用于访问向量a中的第二个和第四个元素。更多示例如下：

① 由于R中内置了同名函数c()，最好不要在编码时使用c作为对象名，否则可能产生一些不易察觉的问题。——译者注

```
> a <- c(1, 2, 5, 3, 6, -2, 4)
> a[3]
[1] 5
> a[c(1, 3, 5)]
[1] 1 5 6
> a[2:6]
[1]  2  5  3  6 -2
```

最后一个语句中使用的冒号用于生成一个数值序列。例如，a <- c(2:6)等价于a <- c(2, 3, 4, 5, 6)。

2.2.2 矩阵

矩阵是一个二维数组，只是每个元素都拥有相同的模式（数值型、字符型或逻辑型）。可通过函数matrix创建矩阵。一般使用格式为：

```
myymatrix <- matrix(vector, nrow=number_of_rows, ncol=number_of_columns,
                    byrow=logical_value, dimnames=list(
                    char_vector_rownames, char_vector_colnames))
```

其中vector包含了矩阵的元素，nrow和ncol用以指定行和列的维数，dimnames包含了可选的、以字符型向量表示的行名和列名。选项byrow则表明矩阵应当按行填充（byrow=TRUE）还是按列填充（byrow=FALSE），默认情况下按列填充。代码清单2-1中的代码演示了matrix函数的用法。

代码清单2-1　创建矩阵

```
  > y <- matrix(1:20, nrow=5, ncol=4)
> y
     [,1] [,2] [,3] [,4]
[1,]    1    6   11   16
[2,]    2    7   12   17
[3,]    3    8   13   18
[4,]    4    9   14   19
[5,]    5   10   15   20
> cells    <- c(1,26,24,68)
> rnames   <- c("R1", "R2")
> cnames   <- c("C1", "C2")
> mymatrix <- matrix(cells, nrow=2, ncol=2, byrow=TRUE,
                     dimnames=list(rnames, cnames))
> mymatrix
   C1 C2
R1  1 26
R2 24 68
> mymatrix <- matrix(cells, nrow=2, ncol=2, byrow=FALSE,
                     dimnames=list(rnames, cnames))
> mymatrix
  C1 C2
R1  1 24
R2 26 68
```

❶ 创建一个5×4的矩阵

❷ 按行填充的2×2矩阵

❸ 按列填充的2×2矩阵

我们首先创建了一个5×4的矩阵❶，接着创建了一个2×2的含列名标签的矩阵，并按行进行

填充❷，最后创建了一个2×2的矩阵并按列进行了填充❸。

我们可以使用下标和方括号来选择矩阵中的行、列或元素。X[*i*,]指矩阵x中的第*i*行，X[,*j*]指第*j*列，X[*i*, *j*]指第*i*行第*j*个元素。选择多行或多列时，下标*i*和*j*可为数值型向量，如代码清单2-2所示。

代码清单2-2 矩阵下标的使用

```
> x <- matrix(1:10, nrow=2)
> x
     [,1] [,2] [,3] [,4] [,5]
[1,]    1    3    5    7    9
[2,]    2    4    6    8   10
> x[2,]
  [1]  2  4  6  8 10
> x[,2]
[1] 3 4
> x[1,4]
[1] 7
> x[1, c(4,5)]
[1] 7 9
```

首先，我们创建了一个内容为数字1到10的2×5矩阵。默认情况下，矩阵按列填充。然后，我们分别选择了第二行和第二列的元素。接着，又选择了第一行第四列的元素。最后选择了位于第一行第四、第五列的元素。

矩阵都是二维的，和向量类似，矩阵中也仅能包含一种数据类型。当维度超过2时，不妨使用数组（2.2.3节）。当有多种模式的数据时，不妨使用数据框（2.2.4节）。

2.2.3 数组

数组（array）与矩阵类似，但是维度可以大于2。数组可通过array函数创建，形式如下：

```
myarray <- array(vector, dimensions, dimnames)
```

其中*vector*包含了数组中的数据，*dimensions*是一个数值型向量，给出了各个维度下标的最大值，而*dimnames*是可选的、各维度名称标签的列表。代码清单2-3给出了一个创建三维（2×3×4）数值型数组的示例。

代码清单2-3 创建一个数组

```
> dim1 <- c("A1", "A2")
> dim2 <- c("B1", "B2", "B3")
> dim3 <- c("C1", "C2", "C3", "C4")
> z <- array(1:24, c(2, 3, 4), dimnames=list(dim1, dim2, dim3))
> z
, , C1

   B1 B2 B3
A1  1  3  5
A2  2  4  6
```

```
, , C2

   B1 B2 B3
A1  7  9 11
A2  8 10 12

, , C3

   B1 B2 B3
A1 13 15 17
A2 14 16 18

, , C4

   B1 B2 B3
A1 19 21 23
A2 20 22 24
```

如你所见，数组是矩阵的一个自然推广。它们在编写新的统计方法时可能很有用。像矩阵一样，数组中的数据也只能拥有一种模式。

从数组中选取元素的方式与矩阵相同。上例中，元素`z[1,2,3]`为15。

2.2.4　数据框

由于不同的列可以包含不同模式（数值型、字符型等）的数据，数据框的概念较矩阵来说更为一般。它与你通常在SAS、SPSS和Stata中看到的数据集类似。数据框将是你在R中最常处理的数据结构。

表2-1所示的病例数据集包含了数值型和字符型数据。由于数据有多种模式，无法将此数据集放入一个矩阵。在这种情况下，使用数据框是最佳选择。

数据框可通过函数`data.frame()`创建：

```
mydata <- data.frame(col1, col2, col3,…)
```

其中的列向量*col1*，*col2*，*col3*，… 可为任何类型（如字符型、数值型或逻辑型）。每一列的名称可由函数`names`指定。代码清单2-4清晰地展示了相应用法。

代码清单2-4　创建一个数据框

```
> patientID <- c(1, 2, 3, 4)
> age <- c(25, 34, 28, 52)
> diabetes <- c("Type1", "Type2", "Type1", "Type1")
> status <- c("Poor", "Improved", "Excellent", "Poor")
> patientdata <- data.frame(patientID, age, diabetes, status)
> patientdata
  patientID age diabetes    status
1         1  25    Type1      Poor
2         2  34    Type2  Improved
3         3  28    Type1 Excellent
4         4  52    Type1      Poor
```

每一列数据的模式必须唯一，不过你却可以将多个模式的不同列放到一起组成数据框。由于数据框与分析人员通常设想的数据集的形态较为接近，我们在讨论数据框时将交替使用术语列和变量。

选取数据框中元素的方式有若干种。你可以使用前述（如矩阵中的）下标记号，亦可直接指定列名。代码清单2-5使用之前创建的patientdata数据框演示了这些方式。

代码清单2-5 选取数据框中的元素

```
> patientdata[1:2]
> patientdata[1:2]
  patientID age
1         1  25
2         2  34
3         3  28
4         4  52
> patientdata[c("diabetes", "status")]
  diabetes    status
1    Type1      Poor
2    Type2  Improved
3    Type1 Excellent
4    Type1      Poor
> patientdata$age
[1] 25 34 28 52
```

❶ 表示patientdata数据框中的变量age

第三个例子中的记号$是新出现的❶。它被用来选取一个给定数据框中的某个特定变量。例如，如果你想生成糖尿病类型变量diabetes和病情变量status的列联表，使用以下代码即可：

```
> table(patientdata$diabetes, patientdata$status)

        Excellent Improved Poor
  Type1         1        0    2
  Type2         0        1    0
```

在每个变量名前都键入一次patientdata$可能会让人生厌，所以不妨走一些捷径。可以联合使用函数attach()和detach()或单独使用函数with()来简化代码。

1. attach()、detach()和with()

函数attach()可将数据框添加到R的搜索路径中。R在遇到一个变量名以后，将检查搜索路径中的数据框，以定位到这个变量。以第1章中的mtcars数据框为例，可以使用以下代码获取每加仑行驶英里数（mpg）变量的描述性统计量，并分别绘制此变量与发动机排量（disp）和车身重量（wt）的散点图：

```
summary(mtcars$mpg)
plot(mtcars$mpg, mtcars$disp)
plot(mtcars$mpg, mtcars$wt)
```

以上代码也可写成：

```
attach(mtcars)
  summary(mpg)
  plot(mpg, disp)
  plot(mpg, wt)
detach(mtcars)
```

函数detach()将数据框从搜索路径中移除。值得注意的是，detach()并不会对数据框本身做任何处理。这句是可以省略的，但其实它应当被例行地放入代码中，因为这是一个好的编程习惯。（接下来的几章中，为了保持代码片段的简约和简短，我可能会不时地忽略这条良训。）

当名称相同的对象不止一个时，这种方法的局限性就很明显了。考虑以下代码：

```
> mpg <- c(25, 36, 47)
> attach(mtcars)

The following object(s) are masked _by_ '.GlobalEnv':    mpg

> plot(mpg, wt)
Error in xy.coords(x, y, xlabel, ylabel, log) :
  'x' and 'y' lengths differ
> mpg
[1] 25 36 47
```

这里，在数据框mtcars被绑定（attach）之前，我们的环境中已经有了一个名为mpg的对象。在这种情况下，原始对象将取得优先权，这与你想要的结果有所出入。由于mpg中有3个元素而disp中有32个元素，故plot语句出错。函数attach()和detach()最好在你分析一个单独的数据框，并且不太可能有多个同名对象时使用。任何情况下，都要当心那些告知某个对象已被屏蔽（masked）的警告。

除此之外，另一种方式是使用函数with()。你可以这样重写上例：

```
with(mtcars, {
  summary(mpg, disp, wt)
  plot(mpg, disp)
  plot(mpg, wt)
})
```

在这种情况下，大括号{}之间的语句都针对数据框mtcars执行，这样就无须担心名称冲突了。如果仅有一条语句（例如summary(mpg)），那么大括号{}可以省略。

函数with()的局限性在于，赋值仅在此函数的括号内生效。考虑以下代码：

```
> with(mtcars, {
   stats <- summary(mpg)
   stats
  })
   Min. 1st Qu.  Median    Mean 3rd Qu.    Max.
  10.40   15.43   19.20   20.09   22.80   33.90
> stats
Error: object 'stats' not found
```

如果你需要创建在with()结构以外存在的对象，使用特殊赋值符<<-替代标准赋值符（<-）即可，它可将对象保存到with()之外的全局环境中。这一点可通过以下代码阐明：

```
> with(mtcars, {
   nokeepstats <- summary(mpg)
   keepstats <<- summary(mpg)
})
> nokeepstats
Error: object 'nokeepstats' not found
> keepstats
```

```
 Min. 1st Qu.  Median    Mean 3rd Qu.    Max.
  10.40   15.43   19.20   20.09   22.80   33.90
```

相对于attach()，多数的R书籍更推荐使用with()。个人认为从根本上说，选择哪一个是自己的偏好问题，并且应当根据你的目的和对于这两个函数含义的理解而定。本书中我们会交替使用这两个函数。

2. 实例标识符

在病例数据中，病人编号（patientID）用于区分数据集中不同的个体。在R中，实例标识符（case identifier）可通过数据框操作函数中的rowname选项指定。例如，语句：

```
patientdata <- data.frame(patientID, age, diabetes, status,
   row.names=patientID)
```

将patientID指定为R中标记各类打印输出和图形中实例名称所用的变量。

2.2.5 因子

如你所见，变量可归结为名义型、有序型或连续型变量。名义型变量是没有顺序之分的类别变量。糖尿病类型Diabetes（Type1、Type2）是名义型变量的一例。即使在数据中Type1编码为1而Type2编码为2，这也并不意味着二者是有序的。有序型变量表示一种顺序关系，而非数量关系。病情Status（poor, improved, excellent）是顺序型变量的一个上佳示例。我们明白，病情为poor（较差）病人的状态不如improved（病情好转）的病人，但并不知道相差多少。连续型变量可以呈现为某个范围内的任意值，并同时表示了顺序和数量。年龄Age就是一个连续型变量，它能够表示像14.5或22.8这样的值以及其间的其他任意值。很清楚，15岁的人比14岁的人年长一岁。

类别（名义型）变量和有序类别（有序型）变量在R中称为因子（factor）。因子在R中非常重要，因为它决定了数据的分析方式以及如何进行视觉呈现。你将在本书中通篇看到这样的例子。

函数factor()以一个整数向量的形式存储类别值，整数的取值范围是[1…k]（其中k是名义型变量中唯一值的个数），同时一个由字符串（原始值）组成的内部向量将映射到这些整数上。

举例来说，假设有向量：

```
diabetes <- c("Type1", "Type2", "Type1", "Type1")
```

语句diabetes <- factor(diabetes)将此向量存储为(1, 2, 1, 1)，并在内部将其关联为1=Type1和2=Type2（具体赋值根据字母顺序而定）。针对向量diabetes进行的任何分析都会将其作为名义型变量对待，并自动选择适合这一测量尺度[①]的统计方法。

要表示有序型变量，需要为函数factor()指定参数ordered=TRUE。给定向量：

```
status <- c("Poor", "Improved", "Excellent", "Poor")
```

语句status <- factor(status, ordered=TRUE)会将向量编码为(3, 2, 1, 3)，并在内部将这些值关联为1=Excellent、2=Improved以及3=Poor。另外，针对此向量进行的任何分析都会将

① 这里的测量尺度是指定类尺度、定序尺度、定距尺度、定比尺度中的定类尺度。——译者注

其作为有序型变量对待，并自动选择合适的统计方法。

对于字符型向量，因子的水平默认依字母顺序创建。这对于因子status是有意义的，因为“Excellent”、“Improved”、“Poor”的排序方式恰好与逻辑顺序相一致。如果“Poor”被编码为“Ailing”，会有问题，因为顺序将为“Ailing”、“Excellent”、“Improved”。如果理想中的顺序是“Poor”、“Improved”、“Excellent”，则会出现类似的问题。按默认的字母顺序排序的因子很少能够让人满意。

你可以通过指定levels选项来覆盖默认排序。例如：

```
status <- factor(status, order=TRUE,
                 levels=c("Poor", "Improved", "Excellent"))
```

各水平的赋值将为1=Poor、2=Improved、3=Excellent。请保证指定的水平与数据中的真实值相匹配，因为任何在数据中出现而未在参数中列举的数据都将被设为缺失值。

代码清单2-6演示了普通因子和有序因子的不同是如何影响数据分析的。

代码清单2-6　因子的使用

```
> patientID <- c(1, 2, 3, 4)
> age <- c(25, 34, 28, 52)
> diabetes <- c("Type1", "Type2", "Type1", "Type1")
> status <- c("Poor", "Improved", "Excellent", "Poor")
> diabetes <- factor(diabetes)
> status <- factor(status, order=TRUE)
> patientdata <- data.frame(patientID, age, diabetes, status)
> str(patientdata)
'data.frame':   4 obs. of  4 variables:
 $ patientID: num  1 2 3 4
 $ age      : num  25 34 28 52
 $ diabetes : Factor w/ 2 levels "Type1","Type2": 1 2 1 1
 $ status   : Ord.factor w/ 3 levels "Excellent"<"Improved"<..: 3 2 1 3
> summary(patientdata)
   patientID          age          diabetes       status
 Min.   :1.00   Min.   :25.00   Type1:3   Excellent:1
 1st Qu.:1.75   1st Qu.:27.25   Type2:1   Improved :1
 Median :2.50   Median :31.00             Poor     :2
 Mean   :2.50   Mean   :34.75
 3rd Qu.:3.25   3rd Qu.:38.50
 Max.   :4.00   Max.   :52.00
```

❶ 以向量形式输入数据

❷ 显示对象的结构

❸ 显示对象的统计概要

首先，以向量的形式输入了数据❶。然后，将diabetes和status分别指定为一个普通因子和一个有序型因子。最后，将数据合并为一个数据框。函数str(*object*)可提供R中某个对象（本例中为数据框）的信息❷。它清楚地显示diabetes是一个因子，而status是一个有序型因子，以及此数据框在内部是如何进行编码的。注意，函数summary()会区别对待各个变量❸。它显示了连续型变量age的最小值、最大值、均值和各四分位数，并显示了类别型变量diabetes和status（各水平）的频数值。

2.2.6 列表

列表（list）是R的数据类型中最为复杂的一种。一般来说，列表就是一些对象（或成分，component）的有序集合。列表允许你整合若干（可能无关的）对象到单个对象名下。例如，某个列表中可能是若干向量、矩阵、数据框，甚至其他列表的组合。可以使用函数`list()`创建列表：

```
mylist <- list(object1, object2, …)
```

其中的对象可以是目前为止讲到的任何结构。你还可以为列表中的对象命名：

```
mylist <- list(name1=object1, name2=object2, …)
```

代码清单2-7展示了一个例子。

代码清单2-7 创建一个列表

```
> g <- "My First List"
> h <- c(25, 26, 18, 39)
> j <- matrix(1:10, nrow=5)
> k <- c("one", "two", "three")
> mylist <- list(title=g, ages=h, j, k)        <—— 创建列表
> mylist                                       <—— 输出整个列表
$title
[1] "My First List"

$ages
[1] 25 26 18 39

[[3]]
     [,1] [,2]
[1,]    1    6
[2,]    2    7
[3,]    3    8
[4,]    4    9
[5,]    5   10

[[4]]
[1] "one"   "two"   "three"

> mylist[[2]]                                  <—— 输出第二个成分
[1] 25 26 18 39
> mylist[["ages"]]
[[1] 25 26 18 39
```

本例创建了一个列表，其中有四个成分：一个字符串、一个数值型向量、一个矩阵以及一个字符型向量。可以组合任意多的对象，并将它们保存为一个列表。

你也可以通过在双重方括号中指明代表某个成分的数字或名称来访问列表中的元素。此例中，`mylist[[2]]`和`mylist[["ages"]]`均指那个含有四个元素的向量。由于两个原因，列表成为了R中的重要数据结构。首先，列表允许以一种简单的方式组织和重新调用不相干的信息。其次，许多R函数的运行结果都是以列表的形式返回的。需要取出其中哪些成分由分析人员决定。你将在后续各章发现许多返回列表的函数示例。

提醒程序员注意的一些事项

经验丰富的程序员通常会发现R语言的某些方面不太寻常。以下是这门语言中你需要了解的一些特性。

- 对象名称中的句点（.）没有特殊意义。但美元符号（$）却有着和其他语言中的句点类似的含义，即指定一个对象中的某些部分。例如，A$x是指数据框A中的变量x。
- R不提供多行注释或块注释功能。你必须以#作为多行注释每行的开始。出于调试目的，你也可以把想让解释器忽略的代码放到语句if(FALSE){...}中。将FALSE改为TRUE即允许这块代码执行。
- 将一个值赋给某个向量、矩阵、数组或列表中一个不存在的元素时，R将自动扩展这个数据结构以容纳新值。举例来说，考虑以下代码：

```
> x <- c(8, 6, 4)
> x[7] <- 10
> x
[1]  8  6  4 NA NA NA 10
```

  通过赋值，向量x由三个元素扩展到了七个元素。

  x <- x[1:3]会重新将其缩减回三个元素。
- R中没有标量。标量以单元素向量的形式出现。
- R中的下标不从0开始，而从1开始。在上述向量中，x[1]的值为8。
- 变量无法被声明。它们在首次被赋值时生成。

要了解更多，参阅John Cook的优秀博文“R programming for those coming from other languages”（www.johndcook.com/Rlanguagefor_programmers.html）。

那些正在寻找编码风格指南的程序员不妨看看“Google'R Style Guide”[①]（http://google-styleguide.googlecode.com/svn/trunk/google-r-style.html。

2.3　数据的输入

现在你已经掌握了各种数据结构，可以放一些数据进去了。作为一名数据分析人员，你通常会面对来自多种数据源和数据格式的数据，你的任务是将这些数据导入你的工具，分析数据，并汇报分析结果。R提供了适用范围广泛的数据导入工具。向R中导入数据的权威指南参见可在http://cran.r-project.org/doc/manuals/R-data.pdf下载的*R Data Import/Export*手册[②]。

如图2-2所示，R可从键盘、文本文件、Microsoft Excel和Access、流行的统计软件、特殊格式的文件，以及多种关系型数据库中导入数据。由于我们无从得知你的数据将来自何处，故会在下文论及各种数据源。读者按需参阅即可。

① 搜索“来自Google的R语言编码风格指南”可以找到这份文档的中文版。——译者注

② 此手册对应的中译名为《R数据的导入和导出》，可在网上找到。——译者注

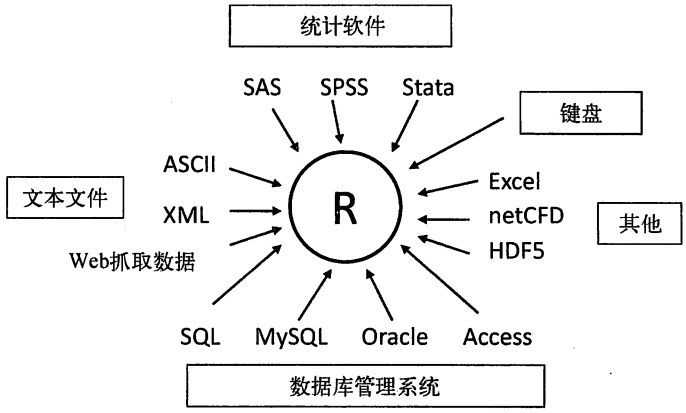


图2-2 可供R导入的数据源

2.3.1 使用键盘输入数据

也许输入数据最简单的方式就是使用键盘了。R中的函数edit()会自动调用一个允许手动输入数据的文本编辑器。具体步骤如下：

(1) 创建一个空数据框（或矩阵），其中变量名和变量的模式需与理想中的最终数据集一致；

(2) 针对这个数据对象调用文本编辑器，输入你的数据，并将结果保存回此数据对象中。

在下例中，你将创建一个名为mydata的数据框，它含有三个变量：age（数值型）、gender（字符型）和weight（数值型）。然后你将调用文本编辑器，键入数据，最后保存结果。

```
mydata <- data.frame(age=numeric(0),
  gender=character(0), weight=numeric(0))
mydata <- edit(mydata)
```

类似于age=numeric(0)的赋值语句将创建一个指定模式但不含实际数据的变量。注意，编辑的结果需要赋值回对象本身。函数edit()事实上是在对象的一个副本上进行操作的。如果你不将其赋值到一个目标，你的所有修改将会全部丢失！

在Windows上调用函数edit()的结果如图2-3所示。

如图2-3所示，我已经自主添加了一些数据。单击列的标题，你就可以用编辑器修改变量名和变量类型（数值型、字符型）。你还可以通过单击未使用列的标题来添加新的变量。编辑器关闭后，结果会保存到之前赋值的对象中（本例中为mydata）。再次调用mydata <- edit(mydata)，就能够编辑已经输入的数据并添加新的数据。语句mydata <- edit(mydata)的一种简捷的等价写法是fix(mydata)。

这种输入数据的方式对于小数据集很有效。对于较大的数据集，你所期望的也许是我们接下来要介绍的方式：从现有的文本文件、Excel电子表格、统计软件或数据库中导入数据。

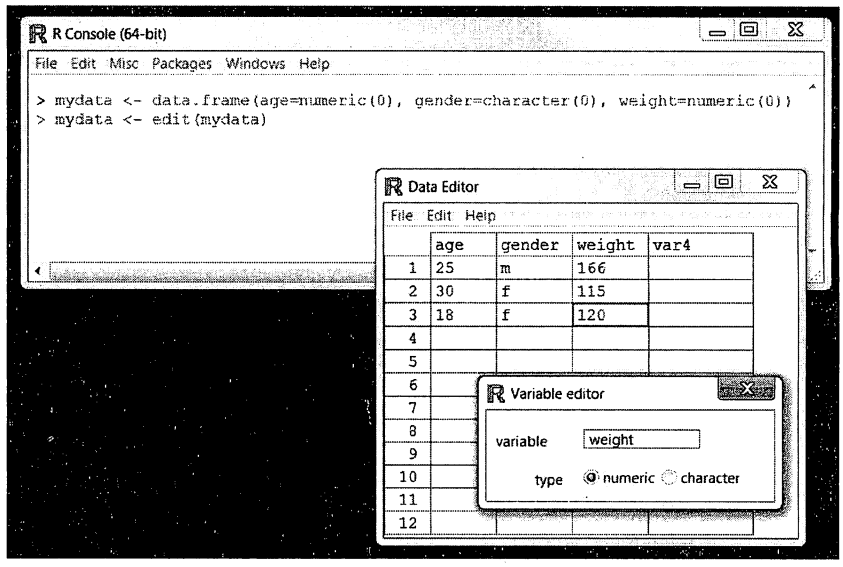


图2-3　通过Windows上内建的编辑器输入数据

2.3.2　从带分隔符的文本文件导入数据

你可以使用read.table()从带分隔符的文本文件中导入数据。此函数可读入一个表格格式的文件并将其保存为一个数据框。其语法如下：

```
mydataframe <- read.table(file, header=logical_value,
  sep="delimiter", row.names="name")
```

其中，*file*是一个带分隔符的ASCII文本文件，header是一个表明首行是否包含了变量名的逻辑值（TRUE或FALSE），sep用来指定分隔数据的分隔符，row.names是一个可选参数，用以指定一个或多个表示行标识符的变量。

举个例子，语句：

```
grades <- read.table("studentgrades.csv", header=TRUE, sep=",",
  row.names="STUDENTID")
```

从当前工作目录中读入了一个名为studentgrades.csv的逗号分隔文件，从文件的第一行取得了各变量名称，将变量STUDENTID指定为行标识符，最后将结果保存到了名为grades的数据框中。

请注意，参数sep允许你导入那些使用逗号以外的符号来分隔行内数据的文件。你可以使用sep="\t"读取以制表符分隔的文件。此参数的默认值为sep=""，即表示分隔符可为一个或多个空格、制表符、换行符或回车符。

默认情况下，字符型变量将转换为因子。我们并不总是希望程序这样做（例如处理一个含有被调查者评论的变量时）。有许多方法可以禁止这种转换行为。其中包括设置选项stringsAsFactors=FALSE，这将停止对所有字符型变量的此种转换。另一种方法是使用选项

colClasses为每一列指定一个类，例如logical（逻辑型）、numeric（数值型）、character（字符型）、factor（因子）。

函数read.table()还拥有许多微调数据导入方式的追加选项。更多详情，请参阅help(read.table)。

注意 本章中的许多示例都是从用户计算机上已经存在的文件中导入数据。R也提供了若干种通过连接（connection）来访问数据的机制。例如，函数file()、gzfile()、bzfile()、xzfile()、unz()和url()可作为文件名参数使用。函数file()允许用户访问文件、剪贴板和C级别的标准输入。函数gzfile()、bzfile()、xzfile()和unz()允许用户读取压缩文件。函数url()能够让你通过一个含有http://、ftp://或file://的完整URL访问网络上的文件，还可以为HTTP和FTP连接指定代理。为了方便，（用""围住的）完整的URL也经常直接用来代替文件名使用。更多详情，参见help(file)。

2.3.3 导入Excel数据

读取一个Excel文件的最好方式，就是在Excel中将其导出为一个逗号分隔文件（csv），并使用前文描述的方式将其导入R中。在Windows系统中，你也可以使用RODBC包来访问Excel文件。电子表格的第一行应当包含变量/列的名称。

首先，下载并安装RODBC包。

```
install.packages("RODBC")
```

你可以使用以下代码导入数据：

```
library(RODBC)
channel <- odbcConnectExcel("myfile.xls")
mydataframe <- sqlFetch(channel, "mysheet")
odbcClose(channel)
```

这里的myfile.xls是一个Excel文件，mysheet是要从这个工作簿中读取工作表的名称，channel是一个由odbcConnectExcel()返回的RODBC连接对象，mydataframe是返回的数据框。RODBC也可用于从Microsoft Access导入数据。更多详情，参见help(RODBC)。

Excel 2007使用了一种名为XLSX的文件格式，实质上是多个XML文件组成的压缩包。xlsx包可以用来读取这种格式的电子表格。在第一次使用此包之前请务必先下载并安装好。包中的函数read.xlsx()可将XLSX文件中的工作表导入为一个数据框。其最简单的调用格式是read.xlsx(*file*, *n*)，其中*file*是Excel 2007工作簿的所在路径，*n*则为要导入的工作表序号。举例说明，在Windows上，以下代码：

```
library(xlsx)
workbook <- "c:/myworkbook.xlsx"
mydataframe <- read.xlsx(workbook, 1)
```

从位于C盘根目录的工作簿myworkbook.xlsx中导入了第一个工作表，并将其保存为一个数据框mydataframe。xlsx包不仅仅可以导入数据表，它还能够创建和操作XLSX文件。那些需要为R和Excel开发接口的程序员应当研究一下这个较新的包。

2.3.4　导入XML数据

以XML格式编码的数据正在逐渐增多。R中有若干用于处理XML文件的包。例如，由Duncan Temple Lang编写的XML包允许用户读取、写入和操作XML文件。XML格式本身已经超出了本书的范围。对使用R存取XML文档感兴趣的读者可以参阅www.omegahat.org/RSXML，从中可以找到若干份优秀的软件包文档。

2.3.5　从网页抓取数据

在Web数据抓取（Webscraping）的过程中，用户从互联网上提取嵌入在网页中的信息，并将其保存为R中的数据结构以做进一步的分析。完成这个任务的一种途径是使用函数readLines()下载网页，然后使用如grep()和gsub()一类的函数处理它。对于结构复杂的网页，可以使用RCurl包和XML包来提取其中想要的信息。更多信息和示例，请参考可在网站*Programming with R*（www.programmingr.com）上找到的“Webscraping using readLines and RCurl”一文。

2.3.6　导入SPSS数据

SPSS数据集可以通过foreign包中的函数read.spss()导入到R中，也可以使用Hmisc包中的spss.get()函数。函数spss.get()是对read. spss()的一个封装，它可以为你自动设置后者的许多参数，让整个转换过程更加简单一致，最后得到数据分析人员所期望的结果。

首先，下载并安装Hmisc包（foreign包已被默认安装）：

```
install.packages("Hmisc")
```

然后使用以下代码导入数据：

```
library(Hmisc)
mydataframe <- spss.get("mydata.sav", use.value.labels=TRUE)
```

这段代码中，mydata.sav是要导入的SPSS数据文件，use.value.labels=TRUE表示让函数将带有值标签的变量导入为R中水平对应相同的因子，mydataframe是导入后的R数据框。

2.3.7　导入SAS数据

R中设计了若干用来导入SAS数据集的函数，包括foreign包中的read.ssd()和Hmisc包中的sas.get()。遗憾的是，如果使用的是SAS的较新版本（SAS 9.1或更高版本），你很可能会发现这些函数并不能正常工作，因为R尚未跟进SAS对文件结构的改动。个人推荐两种解决方案。

你可以在SAS中使用PROC EXPORT将SAS数据集保存为一个逗号分隔的文本文件，并使用

2.3.2节中叙述的方法将导出的文件读取到R中。下面是一个示例：

SAS程序：

```
proc export data=mydata
     outfile="mydata.csv"
     dbms=csv;
run;
```

R程序：

```
mydata <- read.table("mydata.csv", header=TRUE, sep=",")
```

另外，一款名为Stat/Transfer的商业软件（在2.3.12节介绍）可以完好地将SAS数据集（包括任何已知的变量格式）保存为R数据框。

2.3.8 导入 Stata 数据

要将Stata数据导入R中非常简单直接。所需代码类似于：

```
library(foreign)
mydataframe <- read.dta("mydata.dta")
```

这里，mydata.dta是Stata数据集，mydataframe是返回的R数据框。

2.3.9 导入 netCDF 数据

Unidata项目主导的开源软件库netCDF（network Common Data Form，网络通用数据格式）定义了一种机器无关的数据格式，可用于创建和分发面向数组的科学数据。netCDF格式通常用来存储地球物理数据。ncdf包和ncdf4包为netCDF文件提供了高层的R接口。

ncdf包为通过Unidata的netCDF库（版本3或更早）创建的数据文件提供了支持，而且在Windows、Mac OS X和Linux上均可使用。ncdf4包支持netCDF 4或更早的版本，但在Windows上尚不可用。

考虑如下代码：

```
library(ncdf)
nc <- nc_open("mynetCDFfile")
myarray <- get.var.ncdf(nc, myvar)
```

在本例中，对于包含在netCDF文件mynetCDFfile中的变量myvar，其所有数据都被读取并保存到了一个名为myarray的R数组中。

值得注意的是，ncdf包和ncdf4包最近进行了重大升级，使用方式可能与旧版本不同。另外，这两个包中的函数名称也不同。请阅读在线文档以了解详情。

2.3.10 导入 HDF5 数据

HDF5（Hierarchical Data Format，分层数据格式）是一套用于管理超大型和结构极端复杂数据集的软件技术方案。hdf5包能够以那些理解HDF5格式的软件可以读取的格式，将R对象写入到一个文件中。这些文件可以在之后被读回R中。这个包是实验性质的，并假设用户已经安装了

HDF5库（1.2版或更高）。目前，R对于HDF5格式的支持非常有限。

2.3.11　访问数据库管理系统

R中有多种面向关系型数据库管理系统（DBMS）的接口，包括Microsoft SQL Server、Microsoft Access、MySQL、Oracle、PostgreSQL、DB2、Sybase、Teradata以及SQLite。其中一些包通过原生的数据库驱动来提供访问功能，另一些则是通过ODBC或JDBC来实现访问的。使用R来访问存储在外部数据库中的数据是一种分析大数据集的有效手段（参见附录G），并且能够发挥SQL和R各自的优势。

1. ODBC接口

在R中通过RODBC包访问一个数据库也许是最流行的方式，这种方式允许R连接到任意一种拥有ODBC驱动的数据库，其实几乎就是市面上的所有数据库。

第一步是针对你的系统和数据库类型安装和配置合适的ODBC驱动——它们并不是R的一部分。如果你的机器尚未安装必要的驱动，上网搜索一下应该就可以找到。

针对选择的数据库安装并配置好驱动后，请安装RODBC包。你可以使用命令`install.packages("RODBC")`来安装它。

RODBC包中的主要函数列于表2-2中。

表2-2　RODBC中的函数

函　数	描　述
`odbcConnect(dsn,uid="",pwd="")`	建立一个到ODBC数据库的连接
`sqlFetch(channel,sqltable)`	读取ODBC数据库中的某个表到一个数据框中
`sqlQuery(channel,query)`	向ODBC数据库提交一个查询并返回结果
`sqlSave(channel,mydf,tablename=sqtable,append=FALSE)`	将数据框写入或更新（`append=TRUE`）到ODBC数据库的某个表中
`sqlDrop(channel,sqtable)`	删除ODBC数据库中的某个表
`close(channel)`	关闭连接

RODBC包允许R和一个通过ODBC连接的SQL数据库之间进行双向通信。这就意味着你不仅可以读取数据库中的数据到R中，同时也可以使用R修改数据库中的内容。假设你想将某个数据库中的两个表（`Crime`和`Punishment`）分别导入为R中的两个名为`crimedat`和`pundat`的数据框，可以通过如下代码完成这个任务：

```
library(RODBC)
myconn <-odbcConnect("mydsn", uid="Rob", pwd="aardvark")
crimedat <- sqlFetch(myconn, Crime)
pundat <- sqlQuery(myconn, "select * from Punishment")
close(myconn)
```

这里首先载入了RODBC包，并通过一个已注册的数据源名称（`mydsn`）和用户名（`rob`）以及密码（`aardvark`）打开了一个ODBC数据库连接。连接字符串被传递给`sqlFetch`，它将`Crime`

表复制到R数据框crimedat中。然后我们对Punishment表执行了SQL语句select并将结果保存到数据框pundat中。最后，我们关闭了连接。

函数sqlQuery()非常强大，因为其中可以插入任意的有效SQL语句。这种灵活性赋予了你选择指定变量、对数据取子集、创建新变量，以及重编码和重命名现有变量的能力。

2. DBI相关包

DBI包为访问数据库提供了一个通用且一致的客户端接口。构建于这个框架之上的RJDBC包提供了通过JDBC驱动访问数据库的方案。使用时请确保安装了针对你的系统和数据库的必要JDBC驱动。其他有用的、基于DBI的包有RMySQL、ROracle、RPostgreSQL和RSQLite。这些包都为对应的数据库提供了原生的数据库驱动，但可能不是在所有系统上都可用。详情请参阅CRAN（http://cran.r-project.org）上的相应文档。

2.3.12 通过Stat/Transfer导入数据

在我们结束数据导入的讨论之前，值得提到一款能让上述任务的难度显著降低的商业软件。Stat/Transfer（www.stattransfer.com）是一款可在34种数据格式之间作转换的独立应用程序，其中包括R中的数据格式（见图2-4）。

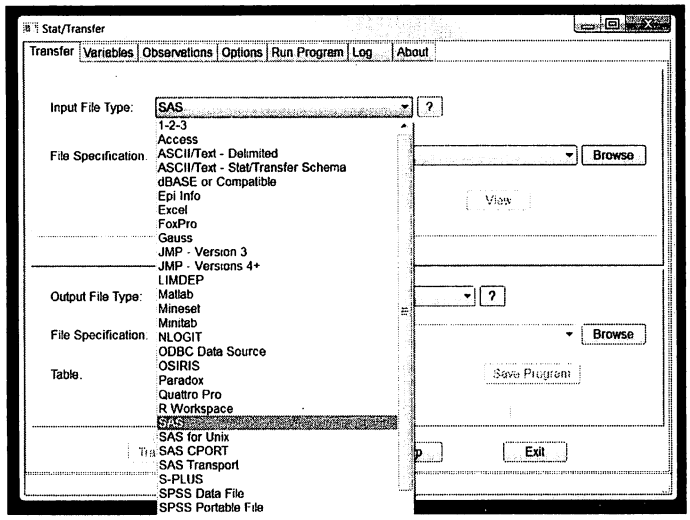


图2-4 Windows上Stat/Transfer的主对话框

此软件拥有Windows、Mac和Unix版本，并且支持我们目前讨论过的各种统计软件的最新版本，也可通过ODBC访问如Oracle、Sybase、Informix和DB/2一类的数据库管理系统。

2.4 数据集的标注

为了使结果更易解读，数据分析人员通常会对数据集进行标注。通常这种标注包括为变量名

添加描述性的标签，以及为类别型变量中的编码添加值标签。例如，对于变量age，你可能想附加一个描述更详细的标签“Age at hospitalization (in years)”（入院年龄）。对于编码为1或2的性别变量gender，你可能想将其关联到标签“male”和“female”上。

2.4.1　变量标签

遗憾的是，R处理变量标签的能力有限。一种解决方法是将变量标签作为变量名，然后通过位置下标来访问这个变量。考虑之前病例数据框的例子。名为age的第二列包含着个体首次入院时的年龄。代码：

```
names(patientdata)[2] <- "Age at hospitalization (in years)"
```

将age重命名为"Age at hospitalization (in years)"。很明显，新的变量名太长，不适合重复输入。作为替代，你可以使用patientdata[2]来引用这个变量，而在本应输出age的地方输出字符串"Age at hospitalization (in years)"。很显然，这个方法并不理想，如果你能尝试想出更好的命名（例如，admissionAge）可能会更好一点。

2.4.2　值标签

函数factor()可为类别型变量创建值标签。继续上例，假设你有一个名为gender的变量，其中1表示男性，2表示女性。你可以使用代码：

```
patientdata$gender <- factor(patientdata$gender,
                             levels = c(1,2),
                             labels = c("male", "female"))
```

来创建值标签。这里levels代表变量的实际值，而labels表示包含了理想值标签的字符型向量。

2.5　处理数据对象的实用函数

在本章末尾，我们来简要总结一下实用的数据对象处理函数（参见表2-3）。

表2-3　处理数据对象的实用函数

函　数	用　途
length(*object*)	显示对象中元素/成分的数量
dim(*object*)	显示某个对象的维度
str(*object*)	显示某个对象的结构
class(*object*)	显示某个对象的类或类型
mode(*object*)	显示某个对象的模式
names(*object*)	显示某对象中各成分的名称
c(*object*, *object*,…)	将对象合并入一个向量

（续）

函　数	用　途
cbind(*object*, *object*, …)	按列合并对象
rbind(*object*, *object*, …)	按行合并对象
Object	输出某个对象
head(*object*)	列出某个对象的开始部分
tail(*object*)	列出某个对象的最后部分
ls()	显示当前的对象列表
rm(*object*, *object*, …)	删除一个或更多个对象。语句rm(list = ls())将删除当前工作环境中的几乎所有对象*
newobject <- edit(*object*)	编辑对象并另存为newobject
fix(*object*)	直接编辑对象

*以句点.开头的隐藏对象将不受影响。——译者注

我们已经讨论过其中的大部分函数。函数head()和tail()对于快速浏览大数据集的结构非常有用。例如，head(patientdata)将列出数据框的前六行，而tail(patientdata)将列出最后六行。我们将在下一章中介绍length()、cbind()和rbind()等函数。我们将其汇总于此，仅作参考。

2.6 小结

数据的准备可能是数据分析中最具挑战性的任务之一。我们在本章中概述了R中用于存储数据的多种数据结构，以及从键盘和外部来源导入数据的许多可能方式，这是一个不错的起点。特别是，我们将在后续各章中反复地使用向量、矩阵、数据框和列表的概念。掌握通过括号表达式选取元素的能力，对数据的选择、取子集和变换将是非常重要的。

如你所见，R提供了丰富的函数用以访问外部数据，包括普通文本文件、网页、统计软件、电子表格和数据库的数据。虽然本章的焦点是将数据导入到R中，你同样也可以将数据从R导出为这些外部格式。数据的导出在附录C中论及，处理大数据集（GB级到TB级）的方法留待附录G中讨论。

将数据集读入R之后，你很有可能需要将其转化为一种更有助于分析的格式（事实上，我发现处理数据的紧迫感有助于促进学习）。在第4章，我们将会探索创建新变量、变换和重编码已有变量、合并数据集和选择观测的方法。

但在转而探讨数据管理之前，让我们先花些时间在R的绘图上。因为许多读者都是因为对R绘图怀有强烈的兴趣而开始学习R的，为了不让你们再久等，在下一章我们将直接讨论图形的创建。我们关注的重点是管理和定制图形的通用方法，它们在本书余下章节都会用到。

第3章 图形初阶

本章内容

- 图形的创建和保存
- 自定义符号、线条、颜色和坐标轴
- 标注文本和标题
- 控制图形维度
- 组合多个图形

我曾经多次向客户展示以数字和文字表示的、精心整理的统计分析结果，得到的只是客户呆滞的眼神，尴尬得房间里只能听到鸟语虫鸣。然而，当我使用图形向相同的用户展示相同的信息时，他们往往会兴致盎然，甚至豁然开朗。还有很多次，我都是通过看图才得以发现了数据中的模式，或是检查出了数据中的异常值——这些模式和异常都是在我进行更为正式的统计分析时彻底遗漏的。

人类非常善于从视觉呈现中洞察关系。一幅精心绘制的图形能够帮助你在数以千计的零散信息中做出有意义的比较，提炼出使用其他方法时不那么容易发现的模式。这也是统计图形领域的进展能够对数据分析产生重大影响的原因之一。数据分析师需要观察他们的数据，而R在该领域表现出众。

在本章中，我们将讨论处理图形的一般方法。我们首先探讨如何创建和保存图形，然后关注如何修改那些存在于所有图形中的特征，包括图形的标题、坐标轴、标签、颜色、线条、符号和文本标注。我们的焦点是那些可以应用于所有图形的通用方法。（在后续各章，我们将关注特定类型的图形。）最后，我们将研究组合多幅图形为单幅图形的各种方法。

3.1 使用图形

R是一个惊艳的图形构建平台。这里我特意使用了“构建”一词。在通常的交互式会话中，你可以通过逐条输入语句构建图形，逐渐完善图形特征，直至得到想要的效果。

考虑以下五行代码：

```
attach(mtcars)
plot(wt, mpg)
```

```
abline(lm(mpg~wt))
title("Regression of MPG on Weight")
detach(mtcars)
```

首句绑定了数据框mtcars。第二条语句打开了一个图形窗口并生成了一幅散点图，横轴表示车身重量，纵轴为每加仑汽油行驶的英里数。第三句向图形添加了一条最优拟合曲线。第四句添加了标题。最后一句为数据框解除了绑定。在R中，图形通常都是以这种交互式的风格绘制的（参见图3-1）。

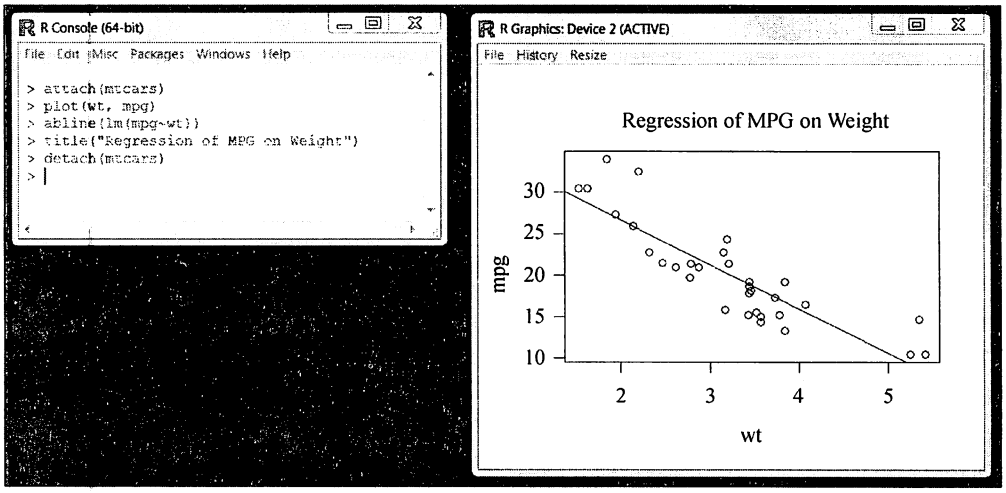


图3-1 创建图形

可以通过代码或图形用户界面来保存图形。要通过代码保存图形，将绘图语句夹在开启目标图形设备的语句和关闭目标图形设备的语句之间即可。例如，以下代码会将图形保存到当前工作目录中名为mygraph.pdf的PDF文件中：

```
pdf("mygraph.pdf")
 attach(mtcars)
 plot(wt, mpg)
 abline(lm(mpg~wt))
 title("Regression of MPG on Weight")
 detach(mtcars)
dev.off()
```

除了pdf()，还可以使用函数win.metafile()、png()、jpeg()、bmp()、tiff()、xfig()和postscript()将图形保存为其他格式。（注意，Windows图元文件格式仅在Windows系统中可用。）关于保存图形输出到文件的更多细节，可以参考1.3.4节。

通过图形用户界面保存图形的方法因系统而异。对于Windows，在图形窗口中选择“文件”→“另存为”，然后在弹出的对话框中选择想要的格式和保存位置即可。在Mac上，当Quartz图形窗口处于高亮状态时，点选菜单栏中的“文件”→“另存为”即可。其提供的输出格式仅有PDF。在UNIX系统中，图形必须使用代码来保存。在附录A中，我们将考虑每个系统中可用的备选图形用户界面，这将给予你更多选择。

通过执行如plot()、hist()（绘制直方图）或boxplot()这样的高级绘图命令来创建一幅新图形时，通常会覆盖掉先前的图形。如何才能创建多个图形并随时查看每一个呢？方法有若干。

第一种方法，你可以在创建一幅新图形之前打开一个新的图形窗口：

```
dev.new()
 statements to create graph 1
dev.new()
 statements to create a graph 2
etc.
```

每一幅新图形将出现在最近一次打开的窗口中。

第二种方法，你可以通过图形用户界面来查看多个图形。在Mac上，你可以使用Quartz菜单中的“后退”（Back）和“前进”（Forward）来逐个浏览图形。在Windows上，这个过程分为两步。在打开第一个图形窗口以后，勾选“历史”（History）→“记录”（Recording）。然后使用菜单中的“上一个”（Previous）和“下一个”（Next）来逐个查看已经绘制的图形。

第三种也是最后一种方法，你可以使用函数dev.new()、dev.next()、dev.prev()、dev.set()和dev.off()同时打开多个图形窗口，并选择将哪个输出发送到哪个窗口中。这种方法全平台适用。关于这种方法的更多细节，请参考help(dev.cur)。

R将在保证用户输入最小化的前提下创建尽可能美观的图形。不过你依然可以使用图形参数来指定字体、颜色、线条类型、坐标轴、参考线和标注。其灵活度足以让我们实现对图形的高度定制。

我们将以一个简单的图形作为本章的开始，接着进一步探索按需修改和强化图形的方式。然后，我们将着眼于一些更复杂的示例，以阐明其他的图形定制方法。我们关注的焦点是那些可以应用于多种R图形的技术。对于本书中描述的所有图形，本章讨论的方法均有效，不过第16章中使用lattice包创建的图形是例外。（lattice包拥有自己的图形外观定制方法。）在其他各章中，我们将探索各种特定的图形，并探讨它们在何时何地最有用。

3.2　一个简单的例子

让我们从表3-1中给出的假想数据集开始。它描述了病人对两种药物五个剂量水平上的响应情况。

表3-1　病人对两种药物五个剂量水平上的响应情况

剂　量	对药物A的响应	对药物B的响应
20	16	15
30	20	18
40	27	25
45	40	31
60	60	40

可以使用以下代码输入数据：

```
dose  <- c(20, 30, 40, 45, 60)
drugA <- c(16, 20, 27, 40, 60)
drugB <- c(15, 18, 25, 31, 40)
```

使用以下代码可以创建一幅描述药物A的剂量和响应关系的图形：

```
plot(dose, drugA, type="b")
```

plot()是R中为对象作图的一个泛型函数（它的输出将根据所绘制对象类型的不同而变化）。本例中，plot(x, y, type="b")将x置于横轴，将y置于纵轴，绘制点集(x, y)，然后使用线段将其连接。选项type="b"表示同时绘制点和线。使用help(plot)可以查看其他选项。结果如图3-2所示。

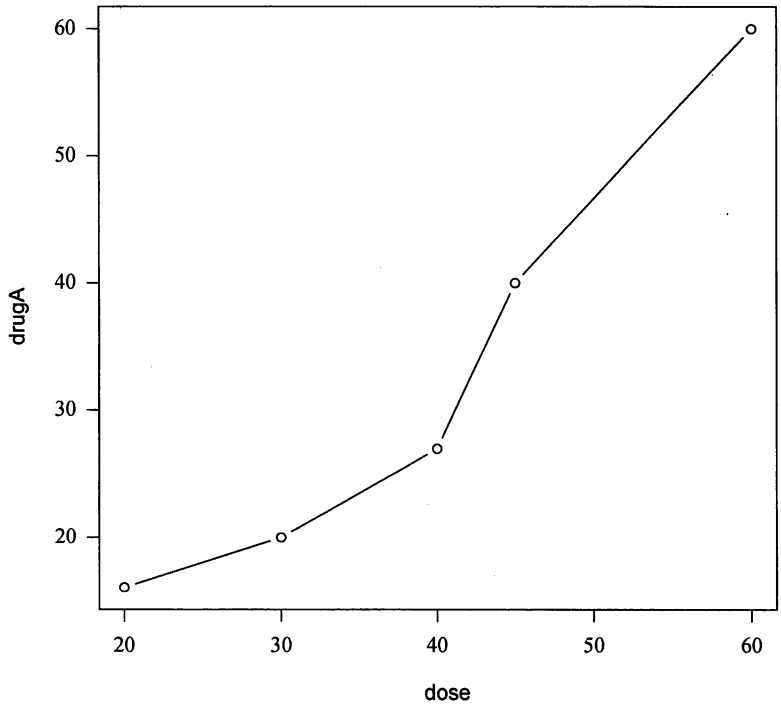


图3-2 药物A剂量和响应的折线图

折线图将于第11章中详述。现在我们先来修改此图的外观。

3.3 图形参数

我们可以通过修改称为图形参数的选项来自定义一幅图形的多个特征（字体、颜色、坐标轴、标题）。

（修改图形参数的）一种方法是通过函数par()来指定这些选项。以这种方式设定的参数值除非被再次修改，否则将在会话结束前一直有效。其调用格式为par(*optionname=value*,

optionname=name,...)。不加参数地执行par()将生成一个含有当前图形参数设置的列表。添加参数no.readonly=TRUE可以生成一个可以修改的当前图形参数列表。

继续我们的例子，假设你想使用实心三角而不是空心圆圈作为点的符号，并且想用虚线代替实线连接这些点。你可以使用以下代码完成修改：

```
opar <- par(no.readonly=TRUE)
par(lty=2, pch=17)
plot(dose, drugA, type="b")
par(opar)
```

结果如图3-3所示。

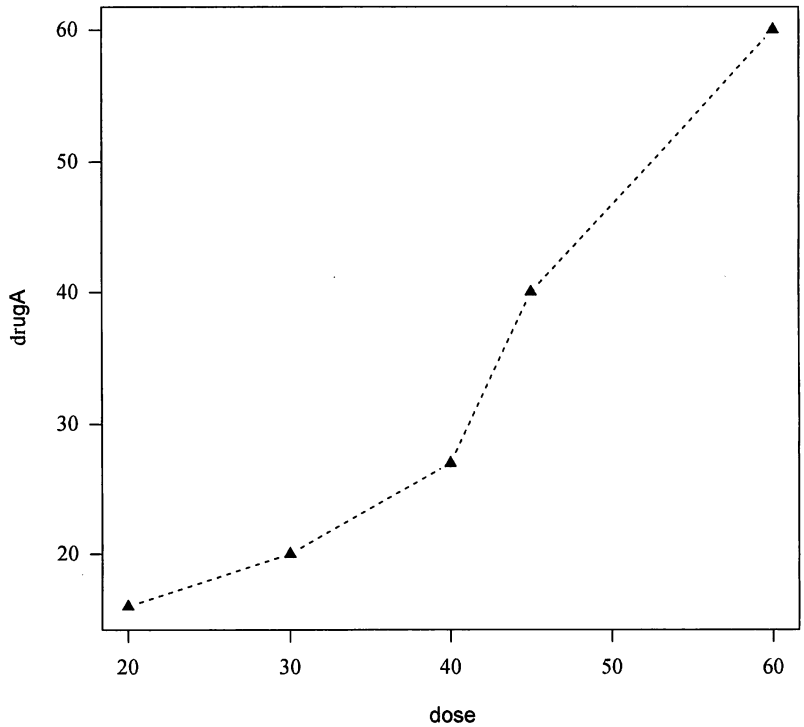


图3-3　药物A剂量和响应的折线图。修改了线条类型和点的符号

首个语句复制了一份当前的图形参数设置。第二句将默认的线条类型修改为虚线（lty=2）并将默认的点符号改为了实心三角（pch=17）。然后我们绘制了图形并还原了原始设置。线条类型和符号将在3.3.1节中详述。

你可以随心所欲地多次使用par()函数，即par(lty=2, pch=17)也可以写成：

```
par(lty=2)
par(pch=17)
```

指定图形参数的第二种方法是为高级绘图函数直接提供*optionname=value*的键值对。这种情况下，指定的选项仅对这幅图形本身有效。你可以通过代码：

```
plot(dose, drugA, type="b", lty=2, pch=17)
```

来生成与上图相同的图形。

并不是所有的高级绘图函数都允许指定全部可能的图形参数。你需要参考每个特定绘图函数的帮助（如?plot、?hist或?boxplot）以确定哪些参数可以以这种方式设置。下面介绍可以设定的许多重要图形参数。

3.3.1 符号和线条

如你所见，可以使用图形参数来指定绘图时使用的符号和线条类型。相关参数如表3-2所示。

表3-2 用于指定符号和线条类型的参数

参 数	描 述
pch	指定绘制点时使用的符号（见图3-4）
cex	指定符号的大小。cex是一个数值，表示绘图符号相对于默认大小的缩放倍数。默认大小为1，1.5表示放大为默认值的1.5倍，0.5表示缩小为默认值的50%，等等
lty	指定线条类型（参见图3-5）
lwd	指定线条宽度。lwd是以默认值的相对大小来表示的（默认值为1）。例如，lwd=2将生成一条两倍于默认宽度的线条

选项pch=用于指定绘制点时使用的符号。可能的值如图3-4所示。

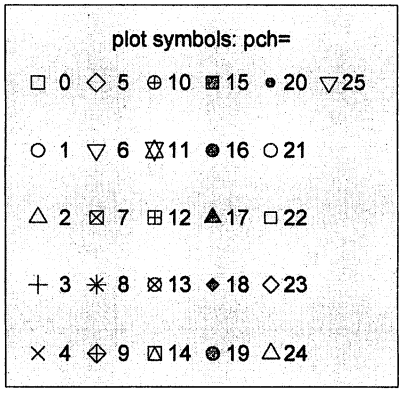


图3-4 参数pch可指定的绘图符号

对于符号21~25，你还可以指定边界颜色（col=）和填充色（bg=）。

选项lty=用于指定想要的线条类型。可用的值如图3-5所示。

综合以上选项，以下代码：

```
plot(dose, drugA, type="b", lty=3, lwd=3, pch=15, cex=2)
```

将绘制一幅图形，其线条类型为点线，宽度为默认宽度的3倍，点的符号为实心正方形，大小为默认符号大小的2倍。结果如图3-6所示。

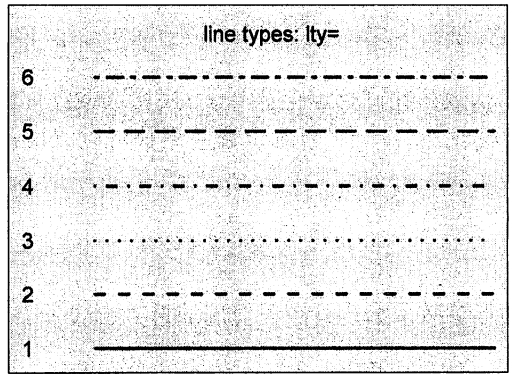


图3-5　参数lty可指定的线条类型

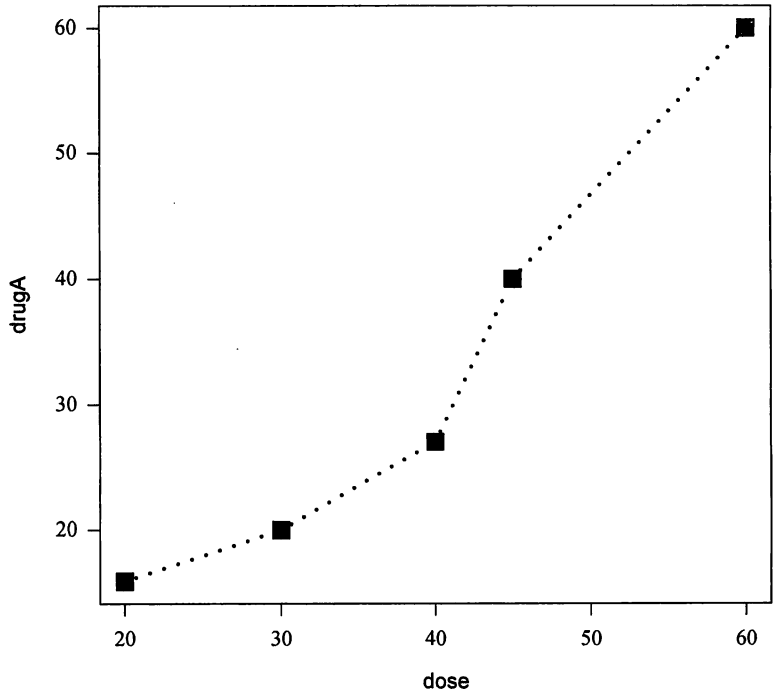


图3-6　药物A剂量和响应的折线图。修改了线条类型、线条宽度、点的符号和符号大小

接下来我们将讨论颜色的指定方法。

3.3.2　颜色

R中有若干和颜色相关的参数。表3-3列出了一些常用参数。

表3-3 用于指定颜色的参数

参 数	描 述
col	默认的绘图颜色。某些函数（如lines和pie）可以接受一个含有颜色值的向量并自动循环使用。例如，如果设定col=c("red", "blue")并需要绘制三条线，则第一条线将为红色，第二条线为蓝色，第三条线又将为红色
col.axis	坐标轴刻度文字的颜色
col.lab	坐标轴标签（名称）的颜色
col.main	标题颜色
col.sub	副标题颜色
fg	图形的前景色
bg	图形的背景色

在R中，可以通过颜色下标、颜色名称、十六进制的颜色值、RGB值或HSV值来指定颜色。举例来说，col=1、col="white"、col="#FFFFFF"、col=rgb(1,1,1)和col=hsv(0,0,1)都是表示白色的等价方式。函数rgb()可基于红-绿-蓝三色值生成颜色，而hsv()则基于色相-饱和度-亮度值来生成颜色。请参考这些函数的帮助以了解更多细节。

函数colors()可以返回所有可用颜色的名称。Earl F. Glynn为R中的色彩创建了一个优秀的在线图表，参见http://research.stowers-institute.org/efg/R/Color/Chart。R中也有多种用于创建连续型颜色向量的函数，包括rainbow()、heat.colors()、terrain.colors()、topo.colors()以及cm.colors()。举例来说，rainbow(10)可以生成10种连续的“彩虹型”颜色。多阶灰度色可使用gray()函数生成。这时要通过一个元素值为0和1之间的向量来指定各颜色的灰度。gray(0:10/10)将生成10阶灰度色。试着使用以下代码：

```
n <- 10
mycolors <- rainbow(n)
pie(rep(1, n), labels=mycolors, col=mycolors)
mygrays <- gray(0:n/n)
pie(rep(1, n), labels=mygrays, col=mygrays)
```

来观察这些函数的工作方式。本章始终会有使用颜色参数的示例。

3.3.3 文本属性

图形参数同样可以用来指定字号、字体和字样。表3-4阐释了用于控制文本大小的参数。字体族和字样可以通过字体选项进行控制（见表3-5）。

表3-4 用于指定文本大小的参数

参 数	描 述
cex	表示相对于默认大小缩放倍数的数值。默认大小为1，1.5表示放大为默认值的1.5倍，0.5表示缩小为默认值的50%，等等
cex.axis	坐标轴刻度文字的缩放倍数。类似于cex

（续）

参　数	描　述
cex.lab	坐标轴标签（名称）的缩放倍数。类似于cex
cex.main	标题的缩放倍数。类似于cex
cex.sub	副标题的缩放倍数。类似于cex

表3-5　用于指定字体族、字号和字样的参数

参　数	描　述
font	整数。用于指定绘图使用的字体样式。1=常规，2=粗体，3=斜体，4=粗斜体，5=符号字体（以Adobe符号编码表示）
font.axis	坐标轴刻度文字的字体样式
font.lab	坐标轴标签（名称）的字体样式
font.main	标题的字体样式
font.sub	副标题的字体样式
ps	字体磅值（1磅约为1/72英寸）。文本的最终大小为 ps*cex
family	绘制文本时使用的字体族。标准的取值为serif（衬线）、sans（无衬线）和mono（等宽）

举例来说，在执行语句：

```
par(font.lab=3, cex.lab=1.5, font.main=4, cex.main=2)
```

之后创建的所有图形都将拥有斜体、1.5倍于默认文本大小的坐标轴标签（名称），以及粗斜体、2倍于默认文本大小的标题。

我们可以轻松设置字号和字体样式，然而字体族的设置却稍显复杂。这是因为衬线、无衬线和等宽字体的具体映射是与图形设备相关的。举例来说，在Windows系统中，等宽字体映射为TT Courier New，衬线字体映射为TT Times New Roman，无衬线字体则映射为TT Arial（TT代表True Type）。如果你对以上映射表示满意，就可以使用类似于family="serif"这样的参数获得想要的结果。如果不满意，则需要创建新的映射。在Windows中，可以通过函数windowsFont()来创建这类映射。例如，在执行语句：

```
windowsFonts(
  A=windowsFont("Arial Black"),
  B=windowsFont("Bookman Old Style"),
  C=windowsFont("Comic Sans MS")
)
```

之后，即可使用A、B和C作为family的取值。在本例的情境下，par(family="A")将指定Arial Black作为绘图字体。（3.4.2节中的代码清单3-2提供了一个修改文本参数的示例。）请注意，函数windowsFont()仅在Windows中有效。在Mac上，请改用quartzFonts()。

如果以PDF或PostScript格式输出图形，则修改字体族会相对简单一些。[1]对于PDF格式，可以使用names(pdfFonts())找出你的系统中有哪些字体是可用的，然后使用pdf(file="*myplot.pdf*", family="*fontname*")来生成图形。对于以PostScript格式输出的图形，则可以对应地使用names(postscriptFonts())和postscript(file="*myplot.ps*", family="*fontname*")。请参阅在线帮助以了解更多信息。

3.3.4 图形尺寸与边界尺寸

最后，可以使用表3-6列出的参数来控制图形尺寸和边界大小。

表3-6 用于控制图形尺寸和边界大小的参数

参 数	描 述
pin	以英寸表示的图形尺寸（宽和高）
mai	以数值向量表示的边界大小，顺序为“下、左、上、右”，单位为英寸
mar	以数值向量表示的边界大小，顺序为“下、左、上、右”，单位为英分*。默认值为c(5, 4, 4, 2) + 0.1

*一英分等于十二分之一英寸。——译者注

代码：

```
par(pin=c(4,3), mai=c(1,.5, 1, .2))
```

可生成一幅4英寸宽、3英寸高、上下边界为1英寸、左边界为0.5英寸、右边界为0.2英寸的图形。关于边界参数的完整指南，不妨参阅Earl F. Glynn编写的一份全面的在线教程（http://research.stowers-institute.org/efg/R/Graphics/Basics/mar-oma/）。

让我们使用最近学到的选项来强化之前的简单图形示例。代码清单3-1中的代码生成的图形如图3-7所示。

代码清单3-1 使用图形参数控制图形外观

```
dose  <- c(20, 30, 40, 45, 60)
drugA <- c(16, 20, 27, 40, 60)
drugB <- c(15, 18, 25, 31, 40)
opar <- par(no.readonly=TRUE)
par(pin=c(2, 3))
par(lwd=2, cex=1.5)
par(cex.axis=.75, font.axis=3)
plot(dose, drugA, type="b", pch=19, lty=2, col="red")
plot(dose, drugB, type="b", pch=23, lty=6, col="blue", bg="green")
par(opar)
```

首先，你以向量的形式输入了数据，然后保存了当前的图形参数设置（这样就可以在稍后恢复设置）。接着，你修改了默认的图形参数，这样，得到的图形将为2英寸宽、3英寸高。除此之外，线条的宽度将为默认宽度的两倍，符号将为默认大小的1.5倍。坐标轴刻度文本被设置为斜

① PDF中文字体的使用比较麻烦，同时在Linux系统中可能会遇到中文字体无法嵌入的问题。Windows上的解决方案之一是使用Cairo包中的CairoPDF()函数。此话题的详细讨论请参考http://cos.name/cn/topic/101521。——译者注

体、缩小为默认大小的75%。之后，我们使用红色实心圆圈和虚线创建了第一幅图形，并使用绿色填充的绿色菱形加蓝色边框和蓝色虚线创建了第二幅图形。最后，我们还原了初始的图形参数设置。

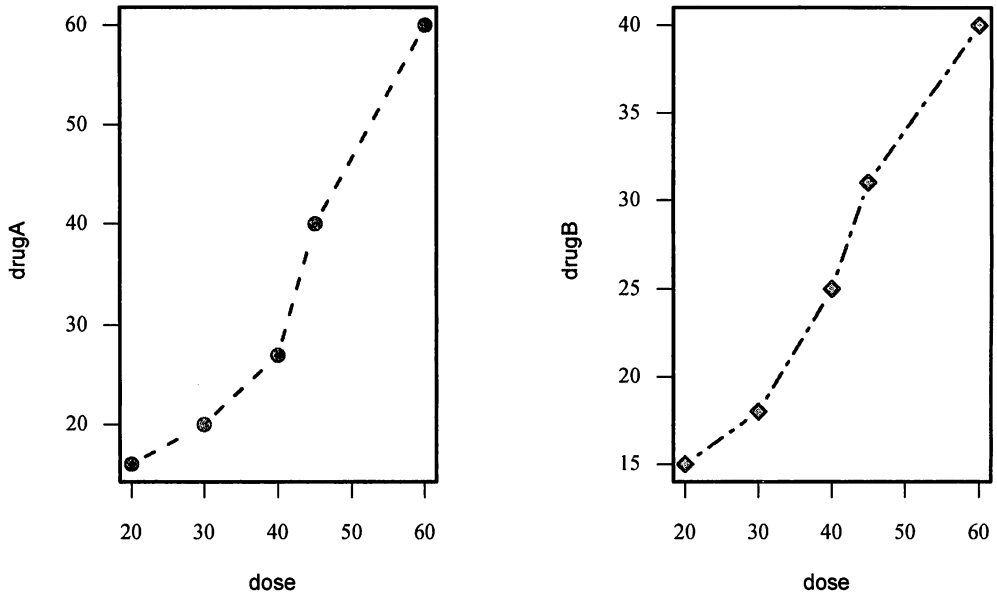


图3-7　药物A和药物B剂量与响应的折线图（另见彩插图3-7）

值得注意的是，通过par()设定的参数对两幅图都有效，而在绘图函数中指定的参数仅对那个特定图形有效。观察图3-7可以发现，图形的呈现上还有一定缺陷。这两幅图都缺少标题，并且纵轴的刻度单位不同，这无疑限制了我们直接比较两种药物的能力。同时，坐标轴的标签（名称）也应当提供更多的信息。

下一节中，我们将转而探讨如何自定义文本标注（如标题和标签）和坐标轴。要了解可用图形参数的更多信息，请参阅help(par)。

3.4　添加文本、自定义坐标轴和图例

除了图形参数，许多高级绘图函数（例如plot、hist、boxplot）也允许自行设定坐标轴和文本标注选项。举例来说，以下代码在图形上添加了标题（main）、副标题（sub）、坐标轴标签（xlab、ylab）并指定了坐标轴范围（xlim、ylim）。结果如图3-8所示。

```
plot(dose, drugA, type="b",
     col="red", lty=2, pch=2, lwd=2,
     main="Clinical Trials for Drug A",
     sub="This is hypothetical data",
     xlab="Dosage", ylab="Drug Response",
     xlim=c(0, 60), ylim=c(0, 70))
```

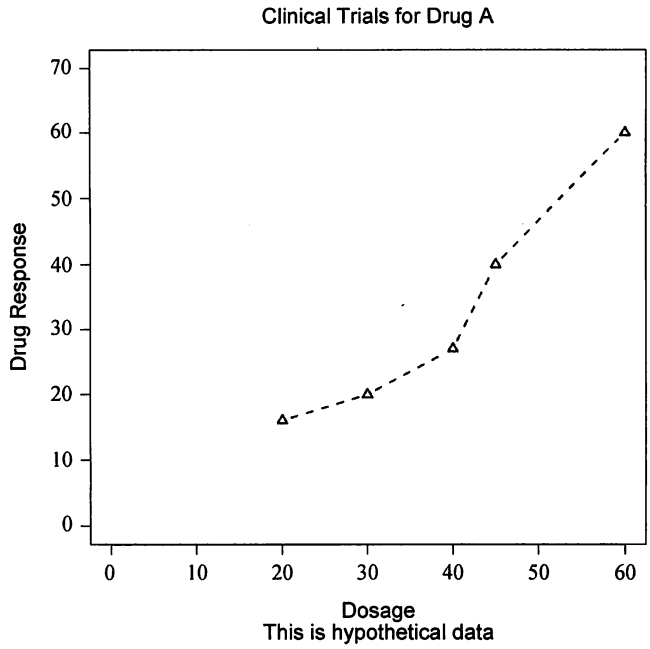


图3-8 药物A剂量和响应的折线图。添加了标题、副标题和自定义的坐标轴

再次提醒，并非所有函数都支持这些选项。请参考相应函数的帮助以了解其可以接受哪些选项。从更精细的控制和模块化的角度考虑，你可以使用本节余下部分描述的函数来控制标题、坐标轴、图例和文本标注的外观。

注意 某些高级绘图函数已经包含了默认的标题和标签。你可以通过在plot()语句或单独的par()语句中添加ann=FALSE来移除它们。

3.4.1 标题

可以使用title()函数为图形添加标题和坐标轴标签。调用格式为：

```
title(main="main title", sub="sub-title",
      xlab="x-axis label", ylab="y-axis label")
```

函数title()中亦可指定其他图形参数（如文本大小、字体、旋转角度和颜色）。举例来说，以下代码将生成红色的标题和蓝色的副标题，以及较默认大小小25%的绿色x轴、y轴标签：

```
title(main="My Title", col.main="red",
      sub="My Sub-title", col.sub="blue",
      xlab="My X label", ylab="My Y label",
      col.lab="green", cex.lab=0.75)
```

3.4.2　坐标轴

你可以使用函数axis()来创建自定义的坐标轴，而非使用R中的默认坐标轴。其格式为：

```
axis(side, at=, labels=, pos=, lty=, col=, las=, tck=, ...)
```

各参数已详述于表3-7中。

表3-7　坐标轴选项

选　项	描　述
side	一个整数，表示在图形的哪边绘制坐标轴（1=下，2=左，3=上，4=右）
at	一个数值型向量，表示需要绘制刻度线的位置
labels	一个字符型向量，表示置于刻度线旁边的文字标签（如果为NULL，则将直接使用at中的值）
pos	坐标轴线绘制位置的坐标（即与另一条坐标轴相交位置的值）
lty	线条类型
col	线条和刻度线颜色
las	标签是否平行于（=0）或垂直于（=2）坐标轴
tck	刻度线的长度，以相对于绘图区域大小的分数表示（负值表示在图形外侧，正值表示在图形内侧，0表示禁用刻度，1表示绘制网格线）；默认值为-0.01
(...)	其他图形参数

创建自定义坐标轴时，你应当禁用高级绘图函数自动生成的坐标轴。参数axes=FALSE将禁用全部坐标轴（包括坐标轴框架线，除非你添加了参数frame.plot=TRUE）。参数xaxt="n"和yaxt="n"将分别禁用*X*轴或*Y*轴（会留下框架线，只是去除了刻度）。代码清单3-2中是一个稍显笨拙和夸张的例子，它演示了我们到目前为止讨论过的各种图形特征。结果如图3-9所示。

代码清单3-2　自定义坐标轴的示例

```
x <- c(1:10)                                  <-- 生成数据
y <- x
z <- 10/x

opar <- par(no.readonly=TRUE)

par(mar=c(5, 4, 4, 8) + 0.1)                  <-- 增加边界大小

plot(x, y, type="b",                          <-- 绘制x对y的图形
     pch=21, col="red",
     yaxt="n", lty=3, ann=FALSE)

lines(x, z, type="b", pch=22, col="blue", lty=2)   <-- 添加x对1/x的直线

axis(2, at=x, labels=x, col.axis="red", las=2)     <-- 绘制你自己的坐标轴

axis(4, at=z, labels=round(z, digits=2),
     col.axis="blue", las=2, cex.axis=0.7, tck=-.01)
```

```
mtext("y=1/x", side=4, line=3, cex.lab=1, las=2, col="blue")

title("An Example of Creative Axes",
      xlab="X values",
      ylab="Y=X")

par(opar)
```

添加标题和文本

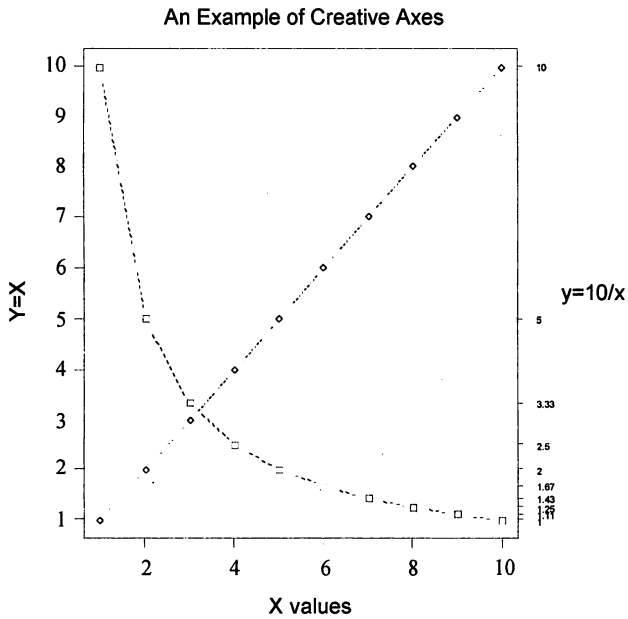


图3-9 各种坐标轴选项的演示

到目前为止，我们已经讨论过代码清单3-2中除lines()和mtext()以外的所有函数。使用plot()语句可以新建一幅图形。而使用lines()语句，你可以为一幅现有图形添加新的图形元素。在3.4.4节中，你会再次用到它，在同一幅图中绘制药物A和药物B的响应情况。函数mtext()用于在图形的边界添加文本。我们将在3.4.5节中讲到函数mtext()，同时会在第11章中更充分地讨论lines()函数。

次要刻度线

注意，我们最近创建的图形都只拥有主刻度线，却没有次要刻度线。要创建次要刻度线，你需要使用Hmisc包中的minor.tick()函数。如果你尚未安装Hmisc包，请先安装它（参考1.4.2节）。你可以使用代码：

```
library(Hmisc)
minor.tick(nx=n, ny=n, tick.ratio=n)
```

来添加次要刻度线。其中nx和ny分别指定了X轴和Y轴每两条主刻度线之间通过次要刻度线划分得到的区间个数。tick.ratio表示次要刻度线相对于主刻度线的大小比例。当前的主刻度线长度可以使用par("tck")获取。举例来说，下列语句将在X轴的每两条主刻度线之间添加1条次要

刻度线，并在Y轴的每两条主刻度线之间添加2条次要刻度线：

```
minor.tick(nx=2, ny=3, tick.ratio=0.5)
```

次要刻度线的长度将是主刻度线的一半。3.4.4节中给出了添加次要刻度线的一个例子（代码清单3-3和图3-10）。

3.4.3　参考线

函数abline()可以用来为图形添加参考线。其使用格式为：

```
abline(h=yvalues, v=xvalues)
```

函数abline()中也可以指定其他图形参数（如线条类型、颜色和宽度）。举例来说：

```
abline(h=c(1,5,7))
```

在y为1、5、7的位置添加了水平实线，而代码：

```
abline(v=seq(1, 10, 2), lty=2, col="blue")
```

则在x为1、3、5、7、9的位置添加了垂直的蓝色虚线。代码清单3-3为我们的药物效果图在y＝30的位置创建了一条参考线。结果如图3-10所示。

3.4.4　图例

当图形中包含的数据不止一组时，图例可以帮助你辨别出每个条形、扇形区域或折线各代表哪一类数据。我们可以使用函数legend()来添加图例（果然不出所料）。其使用格式为：

```
legend(location, title, legend, ...)
```

常用选项详述于表3-8中。

表3-8　图例选项

选　项	描　述
location	有许多方式可以指定图例的位置。你可以直接给定图例左上角的x、y坐标，也可以执行locator(1)，然后通过鼠标单击给出图例的位置，还可以使用关键字bottom、bottomleft、left、topleft、top、topright、right、bottomright或center放置图例。如果你使用了以上某个关键字，那么可以同时使用参数inset=指定图例向图形内侧移动的大小（以绘图区域大小的分数表示）
title	图例标题的字符串（可选）
legend	图例标签组成的字符型向量
...	其他选项。如果图例标示的是颜色不同的线条，需要指定col=加上颜色值组成的向量。如果图例标示的是符号不同的点，则需指定pch=加上符号的代码组成的向量。如果图例标示的是不同的线条宽度或线条类型，请使用lwd=或lty=加上宽度值或类型值组成的向量。要为图例创建颜色填充的盒形（常见于条形图、箱线图或饼图），需要使用参数fill=加上颜色值组成的向量

其他常用的图例选项包括用于指定盒子样式的bty、指定背景色的bg、指定大小的cex，以及指定文本颜色的text.col。指定horiz=TRUE将会水平放置图例，而不是垂直放置。关于图

例的更多细节，请参考help(legend)。这份帮助中给出的示例都特别有用。

让我们看看对药物数据作图的一个例子（代码清单3-3）。你将再次使用我们目前为止讲到的许多图形功能。结果如图3-10所示。

代码清单3-3 依剂量对比药物A和药物B的响应情况

```
dose  <- c(20, 30, 40, 45, 60)
drugA <- c(16, 20, 27, 40, 60)
drugB <- c(15, 18, 25, 31, 40)

opar <- par(no.readonly=TRUE)

par(lwd=2, cex=1.5, font.lab=2)

plot(dose, drugA, type="b",
     pch=15, lty=1, col="red", ylim=c(0, 60),
     main="Drug A vs. Drug B",
     xlab="Drug Dosage", ylab="Drug Response")

lines(dose, drugB, type="b",
      pch=17, lty=2, col="blue")

abline(h=c(30), lwd=1.5, lty=2, col="gray")

library(Hmisc)
minor.tick(nx=3, ny=3, tick.ratio=0.5)

legend("topleft", inset=.05, title="Drug Type", c("A","B"),
       lty=c(1, 2), pch=c(15, 17), col=c("red", "blue"))

par(opar)
```

增加线条、文本、符号、标签的宽度或大小

绘制图形

添加次要刻度线

添加图例

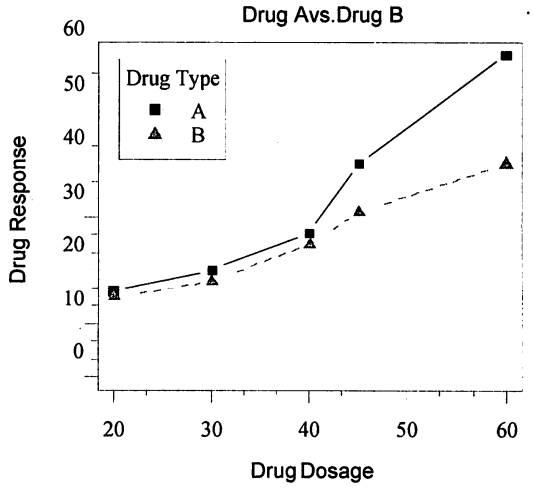


图3-10 进行标注后的图形，对比了药物A和药物B的效果

图3-10的几乎所有外观元素都可以使用本章中讨论过的选项进行修改。除此之外，还有很多其他方式可以指定想要的选项。最后一种需要研究的图形标注是向图形本身添加文本，请继续读下一节。

3.4.5 文本标注

我们可以通过函数text()和mtext()将文本添加到图形上。text()可向绘图区域内部添加文本，而mtext()则向图形的四个边界之一添加文本。使用格式分别为：

```
text(location, "text to place", pos, ...)
mtext("text to place", side, line=n, ...)
```

常用选项列于表3-9中。

表3-9　函数text()和mtext()的选项

选　项	描　述
location	文本的位置参数。可为一对x,y坐标，也可通过指定location为locator(1)使用鼠标交互式地确定摆放位置
pos	文本相对于位置参数的方位。1=下，2=左，3=上，4=右。如果指定了pos，就可以同时指定参数offset=作为偏移量，以相对于单个字符宽度的比例表示
side	指定用来放置文本的边。1=下，2=左，3=上，4=右。你可以指定参数line=来内移或外移文本，随着值的增加，文本将外移。也可使用adj=0将文本向左下对齐，或使用adj=1右上对齐

其他常用的选项有cex、col和font（分别用来调整字号、颜色和字体样式）。

除了用来添加文本标注以外，text()函数也通常用来标示图形中的点。我们只需指定一系列的x, y坐标作为位置参数，同时以向量的形式指定要放置的文本。x、y和文本标签向量的长度应当相同。下面给出了一个示例，结果如图3-11所示。

```
attach(mtcars)
plot(wt, mpg,
     main="Mileage vs. Car Weight",
     xlab="Weight", ylab="Mileage",
     pch=18, col="blue")
text(wt, mpg,
     row.names(mtcars),
     cex=0.6, pos=4, col="red")
detach(mtcars)
```

这里，我们针对数据框mtcars提供的32种车型的车重和每加仑汽油行驶英里数绘制了散点图。函数text()被用来在各个数据点右侧添加车辆型号。各点的标签大小被缩小了40%，颜色为红色。

作为第二个示例，以下是一段展示不同字体族的代码：

```
opar <- par(no.readonly=TRUE)
par(cex=1.5)
plot(1:7,1:7,type="n")
text(3,3,"Example of default text")
text(4,4,family="mono","Example of mono-spaced text")
text(5,5,family="serif","Example of serif text")
par(opar)
```

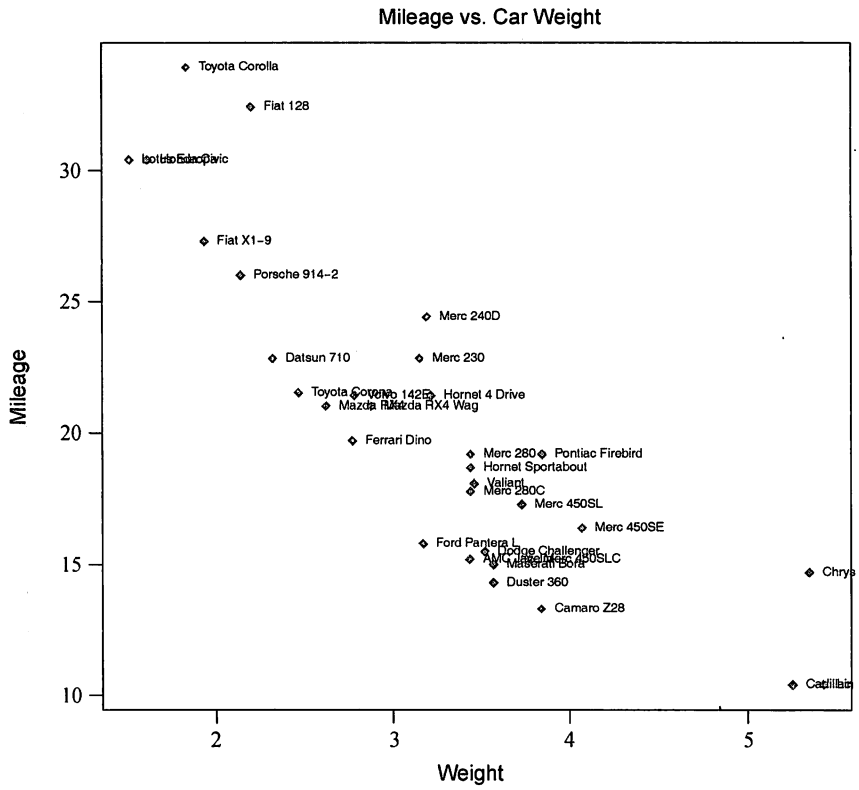


图3-11 一幅散点图（车重与每加仑汽油行驶英里数）的示例，各点均添加了标签（车型）

在Windows系统中输出的结果如图3-12所示。这里为了获得更好的显示效果，我们使用`par()`函数增大了字号。

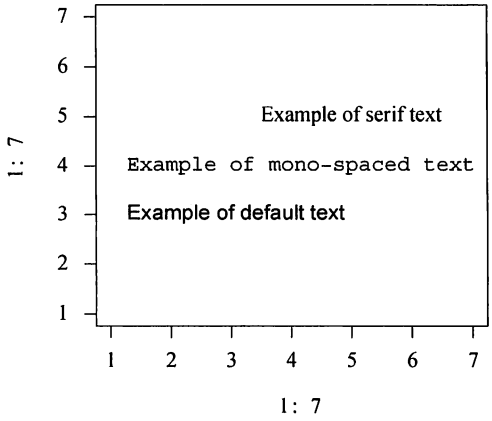


图3-12 Windows中不同字体族的示例

本例所得结果因平台而异，因为不同系统中映射的常规字体、等宽字体和有衬线字体有所不同。在你的系统上，结果看起来如何呢？

数学标注

最后，你可以使用类似于TeX中的写法为图形添加数学符号和公式。请参阅`help(plotmath)`以获得更多细节和示例。要即时看效果，可以尝试执行`demo(plotmath)`。部分运行结果如图3-13所示。函数`plotmath()`可以为图形主体或边界上的标题、坐标轴名称或文本标注添加数学符号。

Arithmetic Operators		Radicals	
x + y	x + y	sqrt(x)	$\sqrt{x}$
x − y	x − y	sqrt(x, y)	$\sqrt[y]{x}$
x * y	xy	Relations	
x/y	x/y	x == y	x = y
x %+−% y	x ± y	x != y	x ↑ y
x%/%y	x √ y	x < y	x < y
x %*% y	x × y	x <= y	x ″ y
x %.% y	x · y	x > y	x > y
−x	−x	x >= y	x ⩾ y
+x	+x	x %~% y	x ⊕ y
Sub/Superscripts		x %=~% y	x ≅ y
x[i]	x_i	x %==% y	x ≡ y
x^2	x^2	x %prop% y	x ∝ y
Juxtaposition		Typeface	
x * y	xy	plain(x)	x
paste(x,y,z)	xyz	italic(x)	*x*
Lists		bold(x)	**x**
list(x,y,z)	x, y, z	bolditalic(x)	***x***
		underline(x)	x̲

图3-13　`demo(plotmath)`的部分结果

同时比较多幅图形，我们通常可以更好地洞察数据的性质。所以，作为本章的结尾，下面讨论将多幅图形组合为一幅图形的方法。

3.5　图形的组合

在R中使用函数`par()`或`layout()`可以容易地组合多幅图形为一幅总括图形。此时请不要担心所要组合图形的具体类型，这里我们只关注组合它们的一般方法。后续各章将讨论每类图形的绘制和解读问题。

你可以在par()函数中使用图形参数mfrow=c(*nrows*, *ncols*)来创建按行填充的、行数为*nrows*、列数为*ncols*的图形矩阵。另外，可以使用nfcol=c(*nrows*, *ncols*)按列填充矩阵。

举例来说，以下代码创建了四幅图形并将其排布在两行两列中：

```
attach(mtcars)
opar <- par(no.readonly=TRUE)
par(mfrow=c(2,2))
plot(wt,mpg, main="Scatterplot of wt vs. mpg")
plot(wt,disp, main="Scatterplot of wt vs disp")
hist(wt, main="Histogram of wt")
boxplot(wt, main="Boxplot of wt")
par(opar)
detach(mtcars)
```

结果如图3-14所示。

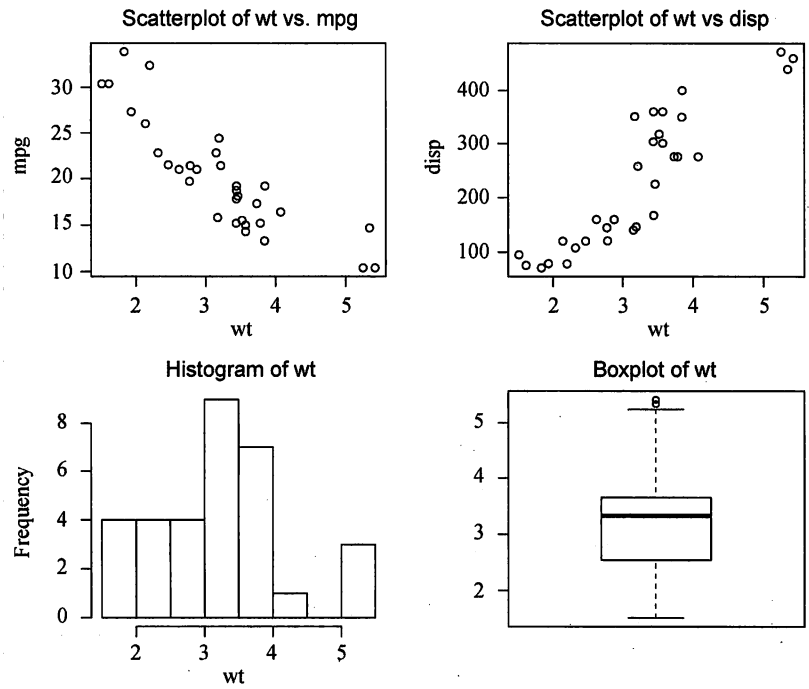


图3-14 通过par(mfrow=c(2,2))组合的四幅图形

作为第二个示例，让我们依3行1列排布3幅图形。代码如下：

```
attach(mtcars)
opar <- par(no.readonly=TRUE)
par(mfrow=c(3,1))
hist(wt)
hist(mpg)
hist(disp)
par(opar)
detach(mtcars)
```

所得图形如图3-15所示。请注意，高级绘图函数hist()包含了一个默认的标题（使用main=""可以禁用它，抑或使用ann=FALSE来禁用所有标题和标签）。

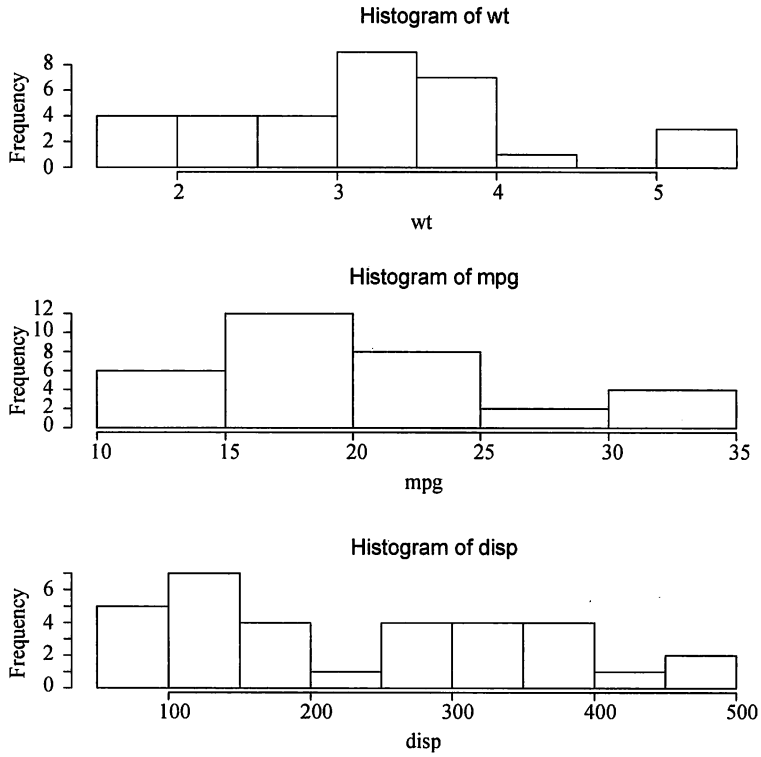


图3-15　通过par(mfrow=c(3,1))组合的三幅图形

函数layout()的调用形式为layout(*mat*)，其中的*mat*是一个矩阵，它指定了所要组合的多个图形的所在位置。在以下代码中，一幅图被置于第1行，另两幅图则被置于第2行：

```
attach(mtcars)
layout(matrix(c(1,1,2,3), 2, 2, byrow = TRUE))
hist(wt)
hist(mpg)
hist(disp)
detach(mtcars)
```

结果如图3-16所示。

为了更精确地控制每幅图形的大小，可以有选择地在layout()函数中使用widths=和heights=两个参数。其形式为：

widths = 各列宽度值组成的一个向量

heights = 各行高度值组成的一个向量

相对宽度可以直接通过数值指定，绝对宽度（以厘米为单位）可以通过函数lcm()来指定。

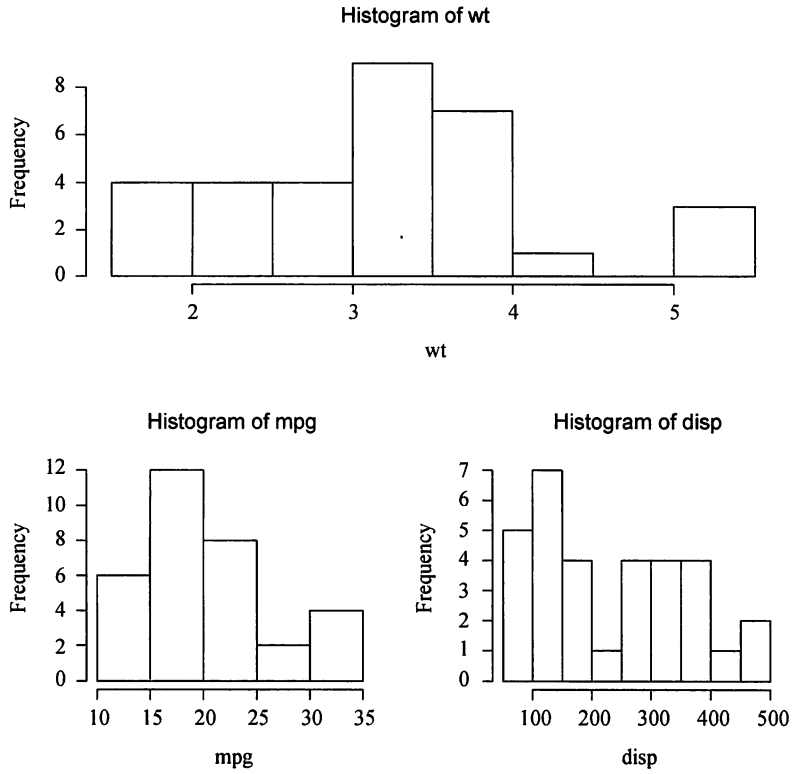


图3-16 使用函数layout()组合的三幅图形，各列宽度为默认值

在以下代码中，我们再次将一幅图形置于第1行，两幅图形置于第2行。但第1行中图形的高度是第2行中图形高度的三分之一。除此之外，右下角图形的宽度是左下角图形宽度的四分之一：

```
attach(mtcars)
layout(matrix(c(1, 1, 2, 3), 2, 2, byrow = TRUE),
       widths=c(3, 1), heights=c(1, 2))
hist(wt)
hist(mpg)
hist(disp)
detach(mtcars)
```

所得图形如图3-17所示。

如你所见，layout()函数能够让我们轻松地控制最终图形中的子图数量和摆放方式，以及这些子图的相对大小。请参考help(layout)以了解更多细节。

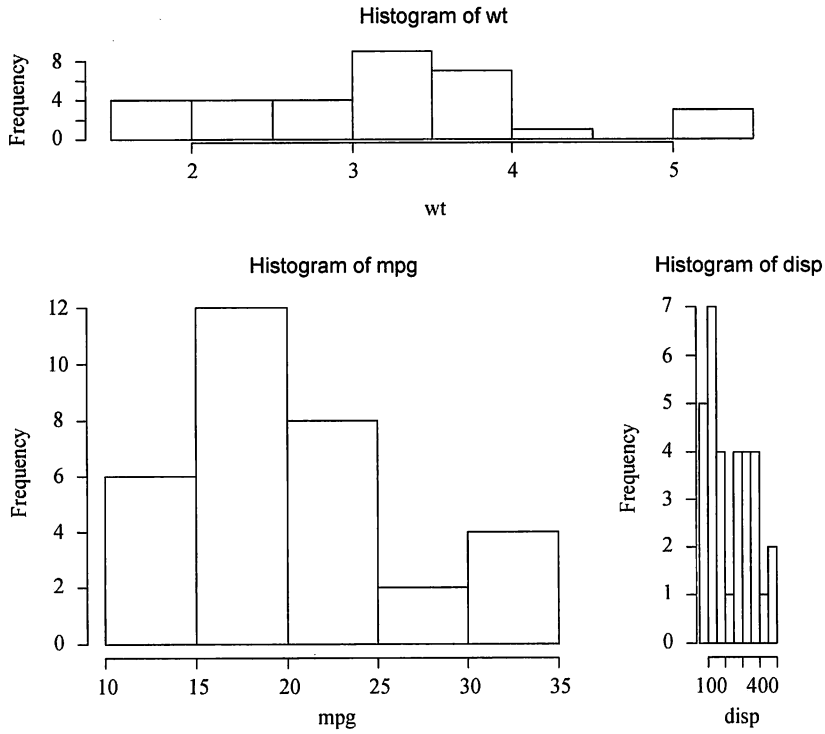


图3-17　使用函数layout()组合的三幅图形，各列宽度为指定值

图形布局的精细控制

可能有很多时候，你想通过排布或叠加若干图形来创建单幅的、有意义的图形，这需要有对图形布局的精细控制能力。你可以使用图形参数fig=完成这个任务。代码清单3-4通过在散点图上添加两幅箱线图，创建了单幅的增强型图形。结果如图3-18所示。

代码清单3-4　多幅图形布局的精细控制

```
opar <- par(no.readonly=TRUE)
par(fig=c(0, 0.8, 0, 0.8))                          ◁── 设置散点图
plot(mtcars$wt, mtcars$mpg,
     xlab="Miles Per Gallon",
     ylab="Car Weight")

par(fig=c(0, 0.8, 0.55, 1), new=TRUE)               ◁── 在上方添加箱线图
boxplot(mtcars$wt, horizontal=TRUE, axes=FALSE)
par(fig=c(0.65, 1, 0, 0.8), new=TRUE)               ◁── 在右侧添加箱线图
boxplot(mtcars$mpg, axes=FALSE)

mtext("Enhanced Scatterplot", side=3, outer=TRUE, line=-3)
par(opar)
```

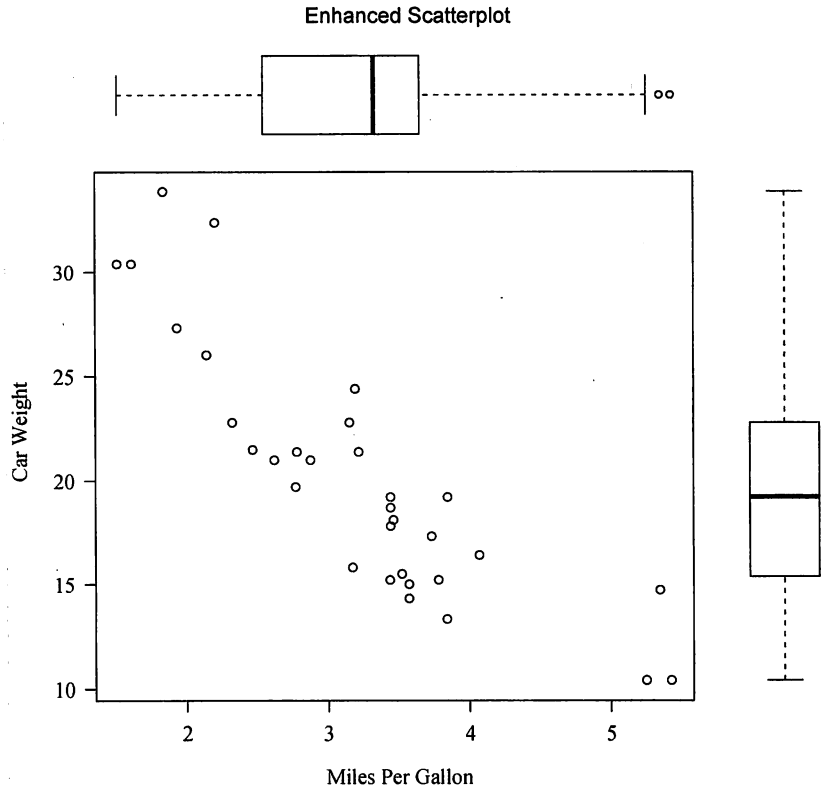


图3-18 边界上添加了两幅箱线图的散点图

要理解这幅图的绘制原理，请试想完整的绘图区域：左下角坐标为(0,0)，而右上角坐标为(1,1)。图3-19是一幅示意图。参数`fig=`的取值是一个形如`c(x1, x2, y1, y2)`的数值向量。

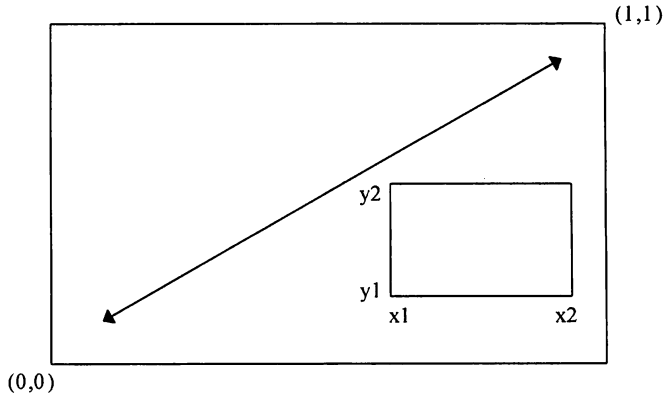


图3-19 使用图形参数`fig=`指定位置

第一个`fig=`将散点图设定为占据横向范围0~0.8，纵向范围0~0.8。上方的箱线图横向占据

0~0.8，纵向0.55~1。右侧的箱线图横向占据0.65~1，纵向0~0.8。`fig=`默认会新建一幅图形，所以在添加一幅图到一幅现有图形上时，请设定参数`new=TRUE`。

我将参数选择为0.55而不是0.8，这样上方的图形就不会和散点图拉得太远。类似地，我选择了参数0.65以拉近右侧箱线图和散点图的距离。你需要不断尝试找到合适的位置参数。

注意　各独立子图所需空间的大小可能与设备相关。如果你遇到了“Error in plot.new(): figure margins too large”这样的错误，请尝试在整个图形的范围内修改各个子图占据的区域位置和大小。

你可以使用图形参数`fig=`将若干图形以任意排布方式组合到单幅图形中。稍加练习，你就可以通过这种方法极其灵活地创建复杂的视觉呈现。

3.6　小结

本章中，我们回顾了创建图形和以各种格式保存图形的方法。本章的主体则是关于如何修改R绘制的默认图形，以得到更加有用或更吸引人的图形。你学习了如何修改一幅图形的坐标轴、字体、绘图符号、线条和颜色，以及如何添加标题、副标题、标签、文本、图例和参考线，看到了如何指定图形和边界的大小，以及将多幅图形组合为实用的单幅图形。

本章的焦点是那些可以应用于所有图形的通用方法（第16章的lattice图形是一个例外）。后续各章将着眼于特定的图形类型。例如，第7章介绍了对单变量绘图的各种方法；对变量间关系绘图的方法将于第11章讨论；在第16章中，我们则讨论高级的绘图方法，包括lattice图形（可以分水平展示变量间的关系）和交互式图形。交互式图形能让你使用鼠标动态探索数据中的关系。

在其他各章中，我们将会讨论对于某些统计方法来说特别实用的数据可视化方法。图形是现代数据分析的核心组成部分，所以我将尽力将它们整合到各类统计方法的讨论中。

在前一章中，我们讨论了一系列输入或导入数据到R中的方法。遗憾的是，现实数据极少以直接可用的格式出现。下一章，我们将关注如何将数据转换或修改为更有助于分析的形式。

第4章 基本数据管理

本章内容

- 操纵日期和缺失值
- 熟悉数据类型的转换
- 变量的创建和重编码
- 数据集的排序，合并与取子集
- 选入和丢弃变量

在第2章中，我们讨论了多种导入数据到R中的方法。遗憾的是，将我们的数据表示为矩阵或数据框这样的矩形形式仅仅是数据准备的第一步。这里可以演绎Kirk船长在《星际迷航》“末日决战的滋味”一集中的台词（这完全验明了我的极客基因）：“数据是一件麻烦事——一件非常非常麻烦的事。”在我的工作中，有多达60%的数据分析时间都花在了实际分析前数据的准备上。我敢大胆地说，多数需要处理现实数据的分析师可能都面临着以某种形式存在的类似问题。让我们先看一个例子。

4.1 一个示例

本人当前工作的研究主题之一是男性和女性在领导各自企业方式上的不同。典型的问题如下。

- 处于管理岗位的男性和女性在听从上级的程度上是否有所不同？
- 这种情况是否依国家的不同而有所不同，或者说这些由性别导致的不同是否普遍存在？

解答这些问题的一种方法是让多个国家的经理人的上司对其服从程度打分，使用的问题类似于：

这名经理在做出人事决策之前会询问我的意见。

1	2	3	4	5
非常不同意	不同意	既不同意也不反对	同意	非常同意

结果数据可能类似于表4-1。各行数据代表了某个经理人的上司对他的评分。

表4-1　领导行为的性别差异

经理人	日　期	国　籍	性　别	年　龄	q1	q2	q3	q4	q5
1	10/24/08	US	M	32	5	4	5	5	5
2	10/28/08	US	F	45	3	5	2	5	5
3	10/01/08	UK	F	25	3	5	5	5	2
4	10/12/08	UK	M	39	3	3	4		
5	05/01/09	UK	F	99	2	2	1	2	1

在这里，每位经理人的上司根据与服从权威相关的五项陈述（q1到q5）对经理人进行评分。例如，经理人1是一位在美国工作的32岁男性，上司对他的评价是惯于顺从，而经理人5是一位在英国工作的，年龄未知（99可能代表缺失）的女性，服从程度评分较低。日期一栏记录了进行评分的时间。

一个数据集中可能含有几十个变量和成千上万的观测，但为了简化示例，我们仅选取了5行10列的数据。另外，我们已将关于经理人服从行为的问题数量限制为5。在现实的研究中，你很可能会使用10到20个类似的问题来提高结果的可靠性和有效性。可以使用代码清单4-1中的代码创建一个包含表4-1中数据的数据框。

代码清单4-1　创建leadership数据框

```
manager <- c(1, 2, 3, 4, 5)
date <- c("10/24/08", "10/28/08", "10/1/08", "10/12/08", "5/1/09")
country <- c("US", "US", "UK", "UK", "UK")
gender <- c("M", "F", "F", "M", "F")
age <- c(32, 45, 25, 39, 99)
q1 <- c(5, 3, 3, 3, 2)
q2 <- c(4, 5, 5, 3, 2)
q3 <- c(5, 2, 5, 4, 1)
q4 <- c(5, 5, 5, NA, 2)
q5 <- c(5, 5, 2, NA, 1)
leadership <- data.frame(manager, date, country, gender, age,
                         q1, q2, q3, q4, q5, stringsAsFactors=FALSE)
```

为了解决感兴趣的问题，我们必须首先解决一些数据管理方面的问题。这里列出其中一部分。

- 五个评分（q1到q5）需要组合起来，即为每位经理人生成一个平均服从程度得分。
- 在问卷调查中，被调查者经常会跳过某些问题。例如，为4号经理人打分的上司跳过了问题4和问题5。我们需要一种处理不完整数据的方法，同时也需要将99岁这样的年龄值重编码为缺失值。
- 一个数据集中也许会有数百个变量，但我们可能仅对其中的一些感兴趣。为了简化问题，我们往往希望创建一个只包含那些感兴趣变量的数据集。
- 既往研究表明，领导行为可能随经理人的年龄而改变，二者存在函数关系。要检验这种观点，我们希望将当前的年龄值重编码为类别型的年龄组（例如年轻、中年、年长）。
- 领导行为可能随时间推移而发生改变。我们可能想重点研究最近全球金融危机期间的服从行为。为了做到这一点，我们希望将研究范围限定在某一个特定时间段收集的数据上（比如，2009年1月1日到2009年12月31日）。

我们将在本章中逐个解决这些问题，同时完成如数据集的组合与排序这样的基本数据管理任务。在第5章，我们会讨论一些更为高级的话题。

4.2 创建新变量

在典型的研究项目中，你可能需要创建新变量或者对现有的变量进行变换。这可以通过以下形式的语句来完成：

变量名←表达式

以上语句中的“表达式”部分可以包含多种运算符和函数。表4-2列出了R中的算术运算符。算术运算符可用于构造公式（formula）。

表4-2 算术运算符

运算符	描述
+	加
-	减
*	乘
/	除
^或**	求幂
x%%y	求模（x mod y）。5%%2的结果为1
x%/%y	整数除法。5%/%2的结果为2

假设你有一个名为mydata的数据框，其中的变量为x1和x2，现在你想创建一个新变量sumx存储以上两个变量的加和，并创建一个名为meanx的新变量存储这两个变量的均值。如果使用代码：

```
sumx  <-  x1 + x2
meanx <- (x1 + x2)/2
```

你将得到一个错误，因为R并不知道x1和x2来自于数据框mydata。如果你转而使用代码：

```
sumx  <-  mydata$x1 + mydata$x2
meanx <- (mydata$x1 + mydata$x2)/2
```

语句可成功执行，但是你只会得到一个数据框（mydata）和两个独立的向量（sumx和meanx）。这也许并不是你想要的。因为从根本上说，你希望将两个新变量整合到原始的数据框中。代码清单4-2提供了三种不同的方式来实现这个目标，具体选择哪一个由你决定，所得结果都是相同的。

代码清单4-2 创建新变量

```
mydata<-data.frame(x1 = c(2, 2, 6, 4),
                   x2 = c(3, 4, 2, 8))

mydata$sumx  <-  mydata$x1 + mydata$x2
mydata$meanx <- (mydata$x1 + mydata$x2)/2
```

```
attach(mydata)
mydata$sumx  <-  x1 + x2
mydata$meanx <- (x1 + x2)/2
detach(mydata)

mydata <- transform(mydata,
                    sumx  =  x1 + x2,
                    meanx = (x1 + x2)/2)
```

我个人倾向于第三种方式，即transform()函数的一个示例。这种方式简化了按需创建新变量并将其保存到数据框中的过程。

4.3　变量的重编码

重编码涉及根据同一个变量和/或其他变量的现有值创建新值的过程。举例来说，你可能想：

- 将一个连续型变量修改为一组类别值；
- 将误编码的值替换为正确值；
- 基于一组分数线创建一个表示及格/不及格的变量。

要重编码数据，可以使用R中的一个或多个逻辑运算符（见表4-3）。逻辑运算符表达式可返回TRUE或FALSE。

表4-3　逻辑运算符

运　算　符	描　　述
<	小于
<=	小于或等于
>	大于
>=	大于或等于
==	严格等于*
!=	不等于
!x	非x
x | y	x或y
x & y	x和y
isTRUE(x)	测试x是否为TRUE

*类似于其他科学计算语言，在R中比较浮点型数值时请慎用==，以防出现误判。详情参考“R FAQ”7.31节。

——译者注

不妨假设你希望将leadership数据集中经理人的连续型年龄变量age重编码为类别型变量agecat（Young、Middle Aged、Elder）。首先，必须将99岁的年龄值重编码为缺失值，使用的代码为：

```
leadership$age[leadership$age  == 99]     <- NA
```

语句variable[condition] <- expression将仅在condition的值为TRUE时执行赋值。在指定好年龄中的缺失值后，你可以接着使用以下代码创建agecat变量：

```
leadership$agecat[leadership$age  > 75]   <- "Elder"
leadership$agecat[leadership$age >= 55 &
                  leadership$age <= 75]   <- "Middle Aged"
leadership$agecat[leadership$age  < 55]   <- "Young"
```

你在leadership$agecat中写上了数据框的名称，以确保新变量能够保存到数据框中。你将中年人（Middle Aged）定义为55到75岁，这样不会让我感觉自己是个老古董。请注意，如果你一开始没把99重编码为age的缺失值，那么经理人5就将在变量agecat中被错误地赋值为“老年人”（Elder）。

这段代码可以写成更紧凑的：

```
leadership <- within(leadership,{
                     agecat <- NA
                     agecat[age > 75]               <- "Elder"
                     agecat[age >= 55 & age <= 75] <- "Middle Aged"
                     agecat[age < 55]               <- "Young" })
```

函数within()与函数with()类似（见2.2.4节），不同的是它允许你修改数据框。首先，我们创建了agecat变量，并将每一行都设为缺失值。括号中剩下的语句接下来依次执行。请记住agecat现在只是一个字符型变量，你可能更希望像2.2.5节讲解的那样把它转换成一个有序型因子。

若干程序包都提供了实用的变量重编码函数，特别地，car包中的recode()函数可以十分简便地重编码数值型、字符型向量或因子。而doBy包提供了另外一个很受欢迎的函数recodevar()。最后，R中也自带了cut()，可将一个数值型变量按值域切割为多个区间，并返回一个因子。

4.4 变量的重命名

如果对现有的变量名称不满意，你可以交互地或者以编程的方式修改它们。假设你希望将变量名manager修改为managerID，并将date修改为testDate，那么可以使用语句：

```
fix(leadership)
```

来调用一个交互式的编辑器，单击变量名，然后在弹出的对话框中将其重命名（见图4-1）。

若以编程方式，reshape包中有一个rename()函数，可用于修改变量名。rename()函数的使用格式为：

```
rename(dataframe, c(oldname="newname", oldname="newname",…))
```

这里是一个示例：

```
library(reshape)
leadership <- rename(leadership,
                     c(manager="managerID", date="testDate")
)
```

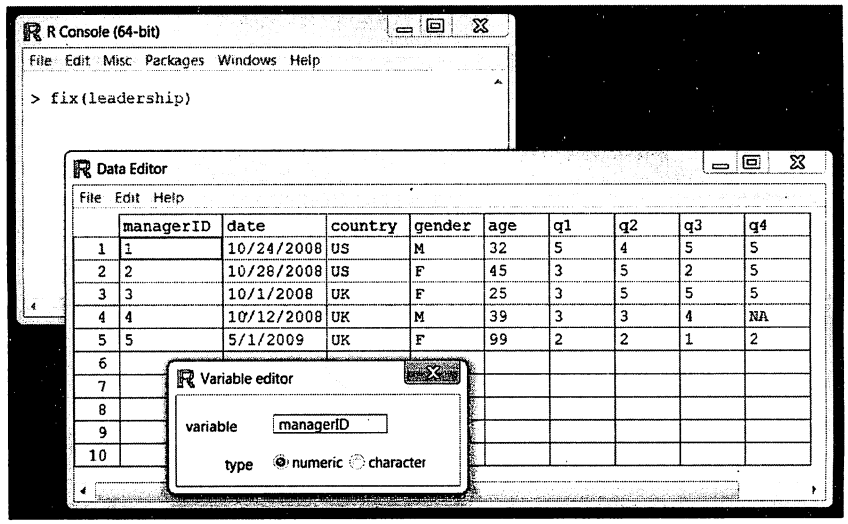


图4-1　使用fix()函数交互式地进行变量重命名

reshape包未被默认安装，所以在首次使用它之前需要先使用install.packages("reshape")命令安装它。reshape包拥有一系列强大的数据集结构修改函数，我们将在第5章中探究其中的一部分。

最后，可以通过names()函数来重命名变量。例如：

```
names(leadership)[2] <- "testDate"
```

将重命名date为testDate，就像以下代码演示的一样：

```
> names(leadership)
 [1] "manager" "date"     "country" "gender"  "age"     "q1"      "q2"
 [8] "q3"      "q4"       "q5"
> names(leadership)[2] <- "testDate"
> leadership
  manager testDate country gender age q1 q2 q3 q4 q5
1       1 10/24/08      US      M  32  5  4  5  5  5
2       2 10/28/08      US      F  45  3  5  2  5  5
3       3  10/1/08      UK      F  25  3  5  5  5  2
4       4 10/12/08      UK      M  39  3  3  4 NA NA
5       5   5/1/09      UK      F  99  2  2  1  2  1
```

以类似的方式：

```
names(leadership)[6:10] <- c("item1", "item2", "item3", "item4", "item5")
```

将重命名q1到q5为item1到item5。

4.5　缺失值

在任何规模的项目中，数据都可能由于未作答问题、设备故障或误编码数据的缘故而不完整。

在R中，缺失值以符号NA（Not Available，不可用）表示。不可能出现的值（例如，被0除的结果）通过符号NaN（Not a Number，非数值）来表示。与SAS等程序不同，R中字符型和数值型数据使用的缺失值符号是相同的。

R提供了一些函数，用于识别包含缺失值的观测。函数is.na()允许你检测缺失值是否存在。假设你有一个向量：

```
y <- c(1, 2, 3, NA)
```

然后使用函数：

```
is.na(y)
```

将返回c(FALSE, FALSE, FALSE, TRUE)。

请注意is.na()函数是如何作用于一个对象上的。它将返回一个相同大小的对象，如果某个元素是缺失值，相应的位置将被改写为TRUE，不是缺失值的位置则为FALSE。代码清单4-3将此函数应用到了我们的leadership数据集上。

代码清单4-3 使用is.na()函数

```
> is.na(leadership[,6:10])
        q1    q2    q3    q4    q5
[1,] FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE
[2,] FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE
[3,] FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE
[4,] FALSE FALSE FALSE  TRUE  TRUE
[5,] FALSE FALSE FALSE FALSE FALSE
```

这里的leadership[,6:10]将数据框限定到第6列至第10列，接下来is.na()识别出了缺失值。

注意 缺失值被认为是不可比较的，即便是与缺失值自身的比较。这意味着无法使用比较运算符来检测缺失值是否存在。例如，逻辑测试myvar == NA的结果永远不会为TRUE。作为替代，你只能使用处理缺失值的函数（如本节中所述的那些）来识别出R数据对象中的缺失值。

4.5.1 重编码某些值为缺失值

如4.3节中演示的那样，你可以使用赋值语句将某些值重编码为缺失值。在我们的leadership示例中，缺失的年龄值被编码为99。在分析这一数据集之前，你必须让R明白本例中的99表示缺失值（否则这些样本的平均年龄将会高得离谱！）。你可以通过重编码这个变量完成这项工作：

```
leadership$age[leadership$age == 99] <- NA
```

任何等于99的年龄值都将被修改为NA。请确保所有的缺失数据已在分析之前被妥善地编码为缺失

值，否则分析结果将失去意义。

4.5.2　在分析中排除缺失值

确定了缺失值的位置以后，你需要在进一步分析数据之前以某种方式删除这些缺失值。原因是，含有缺失值的算术表达式和函数的计算结果也是缺失值。举例来说，考虑以下代码：

```
x <- c(1, 2, NA, 3)
y <- x[1] + x[2] + x[3] + x[4]
z <- sum(x)
```

由于x中的第3个元素是缺失值，所以y和z也都是NA（缺失值）。

好在多数的数值函数都拥有一个na.rm=TRUE选项，可以在计算之前移除缺失值并使用剩余值进行计算：

```
x <- c(1, 2, NA, 3)
y <- sum(x, na.rm=TRUE)
```

这里，y等于6。

在使用函数处理不完整的数据时，请务必查阅它们的帮助文档（例如，help(sum)），检查这些函数是如何处理缺失数据的。函数sum()只是我们将在第5章中讨论的众多函数之一，使用这些函数可以灵活而轻松地转换数据。

你可以通过函数na.omit()移除所有含有缺失值的观测。na.omit()可以删除所有含有缺失数据的行。在代码清单4-4中，我们将此函数应用到了leadership数据集上。

代码清单4-4　使用na.omit()删除不完整的观测

```
> leadership
  manager     date country gender age q1 q2 q3 q4 q5
1       1 10/24/08      US      M  32  5  4  5  5  5
2       2 10/28/08      US      F  40  3  5  2  5  5
3       3 10/01/08      UK      F  25  3  5  5  5  2
4       4 10/12/08      UK      M  39  3  3  4 NA NA
5       5 05/01/09      UK      F  99  2  2  1  2  1

> newdata <- na.omit(leadership)
> newdata
  manager     date country gender age q1 q2 q3 q4 q5
1       1 10/24/08      US      M  32  5  4  5  5  5
2       2 10/28/08      US      F  40  3  5  2  5  5
3       3 10/01/08      UK      F  25  3  5  5  5  2
5       5 05/01/09      UK      F  99  2  2  1  2  1
```

含有缺失数据的数据框

仅含完整观测的数据框

在结果被保存到newdata之前，所有包含缺失数据的行均已从leadership中删除。

删除所有含有缺失数据的观测（称为行删除，listwise deletion）是处理不完整数据集的若干手段之一。如果只有少数缺失值或者缺失值仅集中于一小部分观测中，行删除不失为解决缺失值问题的一种优秀方法。但如果缺失值遍布于数据之中，或者一小部分变量中包含大量的缺失数据，行删除可能会剔除相当比例的数据。我们将在第15章中探索若干更为复杂精妙的缺失值处理方法。下面，让我们谈谈日期值。

4.6 日期值

日期值通常以字符串的形式输入到R中，然后转化为以数值形式存储的日期变量。函数as.Date()用于执行这种转化。其语法为as.Date(*x*, "*input_format*")，其中*x*是字符型数据，*input_format*则给出了用于读入日期的适当格式（见表4-4）。

表4-4 日期格式

符 号	含 义	示 例
%d	数字表示的日期（0~31）	01~31
%a	缩写的星期名	Mon
%A	非缩写星期名	Monday
%m	月份（00~12）	00~12
%b	缩写的月份	Jan
%B	非缩写月份	January
%y	两位数的年份	07
%Y	四位数的年份	2007

日期值的默认输入格式为*yyyy-mm-dd*。语句：

```
mydates <- as.Date(c("2007-06-22", "2004-02-13"))
```

将默认格式的字符型数据转换为了对应日期。相反，

```
strDates <- c("01/05/1965", "08/16/1975")
dates <- as.Date(strDates, "%m/%d/%Y")
```

则使用*mm/dd/yyyy*的格式读取数据。

在我们的leadership数据集中，日期是以*mm/dd/yy*的格式编码为字符型变量的。因此：

```
myformat <- "%m/%d/%y"
leadership$date <- as.Date(leadership$date, myformat)
```

使用指定格式读取字符型变量，并将其作为一个日期变量替换到数据框中。这种转换一旦完成，你就可以使用后续各章中讲到的诸多分析方法对这些日期进行分析和绘图。

有两个函数对于处理时间戳数据特别实用。Sys.Date()可以返回当天的日期，而date()则返回当前的日期和时间。我写下这段文字的时间是2010年12月1日下午4:28。所以执行这些函数的结果是：

```
> Sys.Date()
[1] "2010-12-01"
> date()
[1] "Wed Dec 01 16:28:21 2010"
```

你可以使用函数format(x, format="output_format")来输出指定格式的日期值，并且可以提取日期值中的某些部分：

```
> today <- Sys.Date()
> format(today, format="%B %d %Y")
```

```
[1] "December 01 2010"
> format(today, format="%A")
[1] "Wednesday"
```

format()函数可接受一个参数（本例中是一个日期）并按某种格式输出结果（本例中使用了表4-4中符号的组合）。这里最重要的结果是，距离周末只有两天时间了！

R的内部在存储日期时，是使用自1970年1月1日以来的天数表示的，更早的日期则表示为负数。这意味着可以在日期值上执行算术运算。例如：

```
> startdate <- as.Date("2004-02-13")
> enddate   <- as.Date("2011-01-22")
> days      <- enddate - startdate
> days
Time difference of 2535 days
```

显示了2004年2月13日和2011年1月22日之间的天数。

最后，也可以使用函数difftime()来计算时间间隔，并以星期、天、时、分、秒来表示。假设我出生于1956年10月12日，我现在有多大呢？

```
> today <- Sys.Date()
> dob   <- as.Date("1956-10-12")
> difftime(today, dob, units="weeks")
Time difference of 2825 weeks
```

很明显，我有2825周这么大，谁又知道呢？最后一个小测验：猜猜我生于星期几？

4.6.1　将日期转换为字符型变量

你同样可以将日期变量转换为字符型变量——虽然不太常用。函数as.character()可将日期值转换为字符型：

```
strDates <- as.character(dates)
```

进行转换后，即可使用一系列字符处理函数处理数据（如取子集、替换、连接等）。我们将在第5章中详述字符处理函数。

4.6.2　更进一步

要了解字符型数据转换为日期的更多细节，请查看help(as.Date)和help(strftime)。要了解更多关于日期和时间格式的知识，请参考help(ISOdatetime)。lubridate包中包含了许多简化日期处理的函数，可以用于识别和解析日期-时间数据，抽取日期-时间成分（例如年份、月份、日期等），以及对日期-时间值进行算术运算。如果你需要对日期进行复杂的计算，那么fCalendar包可能会有帮助。它提供了大量的日期处理函数，可以同时处理多个时区，并且提供了复杂的历法操作功能，支持工作日、周末以及假期。

4.7　类型转换

在上节中，我们讨论了将字符数据转换为日期值以及逆向转换的方法。R中提供了一系列用

来判断某个对象的数据类型和将其转换为另一种数据类型的函数。

R与其他统计编程语言有着类似的数据类型转换方式。举例来说，向一个数值型向量中添加一个字符串会将此向量中的所有元素转换为字符型。你可以使用表4-5中列出的函数来判断数据的类型或者将其转换为指定类型。

表4-5 类型转换函数

判 断	转 换
is.numeric()	as.numeric()
is.character()	as.character()
is.vector()	as.vector()
is.matrix()	as.matrix()
is.data.frame()	as.data.frame()
is.factor()	as.factor()
is.logical()	as.logical()

名为is.*datatype*()这样的函数返回TRUE或FALSE，而as.*datatype*()这样的函数则将其参数转换为对应的类型。代码清单4-5提供了一个示例。

代码清单4-5 转换数据类型

```
> a <- c(1,2,3)
> a
[1] 1 2 3
> is.numeric(a)
[1] TRUE
> is.vector(a)
[1] TRUE

> a <- as.character(a)
> a
[1] "1" "2" "3"
> is.numeric(a)
[1] FALSE
> is.vector(a)
[1] TRUE
> is.character(a)
[1] TRUE
```

当和第5章中讨论的控制流（如if-then）结合使用时，is.*datatype*()这样的函数将成为一类强大的工具，即允许根据数据的具体类型以不同的方式处理数据。另外，某些R函数需要接受某个特定类型（字符型或数值型，矩阵或数据框）的数据，as.*datatype*()这类函数可以让你在分析之前先行将数据转换为要求的格式。

4.8 数据排序

有些情况下，查看排序后的数据集可以获得相当多的信息。例如，哪些经理人最具服从意识？在R中，可以使用order()函数对一个数据框进行排序。默认的排序顺序是升序。在排序变量的

前边加一个减号即可得到降序的排序结果。以下示例使用leadership演示了数据框的排序。

语句：

```
newdata <- leadership[order(leadership$age),]
```

创建了一个新的数据集，其中各行依经理人的年龄升序排序。语句：

```
attach(leadership)
newdata <- leadership[order(gender, age),]
detach(leadership)
```

则将各行依女性到男性、同样性别中按年龄升序排序。

最后，

```
attach(leadership)
newdata <-leadership[order(gender, -age),]
detach(leadership)
```

将各行依经理人的性别和年龄降序排序。

4.9　数据集的合并

如果数据分散在多个地方，你就需要在继续下一步之前将其合并。本节展示了向数据框中添加列（变量）和行（观测）的方法。

4.9.1　添加列

要横向合并两个数据框（数据集），请使用merge()函数。在多数情况下，两个数据框是通过一个或多个共有变量进行联结的（即一种内联结，inner join）。例如：

```
total <- merge(dataframeA, dataframeB, by="ID")
```

将dataframeA和dataframeB按照ID进行了合并。类似地，

```
total <- merge(dataframeA, dataframeB, by=c("ID","Country"))
```

将两个数据框按照ID和Country进行了合并。类似的横向联结通常用于向数据框中添加变量。

注意　如果要直接横向合并两个矩阵或数据框，并且不需要指定一个公共索引，那么可以直接使用cbind()函数：

```
total <- cbind(A, B)
```

这个函数将横向合并对象A和对象B。为了让它正常工作，每个对象必须拥有相同的行数，且要以相同顺序排序。

4.9.2　添加行

要纵向合并两个数据框（数据集），请使用rbind()函数：

```
total <- rbind(dataframeA, dataframeB)
```

两个数据框必须拥有相同的变量，不过它们的顺序不必一定相同。如果dataframeA中拥有dataframeB中没有的变量，请在合并它们之前做以下某种处理：

- 删除dataframeA中的多余变量；
- 在dataframeB中创建追加的变量并将其值设为NA（缺失）。

纵向联结通常用于向数据框中添加观测。

4.10 数据集取子集

R拥有强大的索引特性，可以用于访问对象中的元素。也可利用这些特性对变量或观测进行选入和排除。以下几节演示了对变量和观测进行保留或删除的若干方法。

4.10.1 选入（保留）变量

从一个大数据集中选择有限数量的变量来创建一个新的数据集是常有的事。在第2章中，数据框中的元素是通过*dataframe[row indices, column indices]*这样的记号来访问的。你可以沿用这种方法来选择变量。例如：

```
newdata <- leadership[, c(6:10)]
```

从leadership数据框中选择了变量q1、q2、q3、q4和q5，并将它们保存到了数据框newdata中。将行下标留空（，）表示默认选择所有行。

语句：

```
myvars <- c("q1", "q2", "q3", "q4", "q5")
newdata <-leadership[myvars]
```

实现了等价的变量选择。这里，（引号中的）变量名充当了列的下标，因此选择的列是相同的。

最后，其实你可以写：

```
myvars <- paste("q", 1:5, sep="")
newdata <- leadership[myvars]
```

本例使用paste()函数创建了与上例中相同的字符型向量。paste()函数将在第5章中讲解。

4.10.2 剔除（丢弃）变量

剔除变量的原因有很多。举例来说，如果某个变量中有若干缺失值，你可能就想在进一步分析之前将其丢弃。下面是一些剔除变量的方法。

你可以使用语句：

```
myvars <- names(leadership) %in% c("q3", "q4")
newdata <- leadership[!myvars]
```

剔除变量q3和q4。为了理解以上语句的原理，你需要把它拆解如下。

(1) names(leadership)生成了一个包含所有变量名的字符型向量： c("managerID",

"testDate","country","gender","age","q1", "q2","q3","q4","q5")。

(2) names(leadership) %in% c("q3", "q4")返回了一个逻辑型向量，names(leadership)中每个 匹配q3或q4的元素的值为TRUE，反之为FALSE：c(FALSE, FALSE, FALSE, FALSE, FALSE, FALSE, FALSE, TRUE, TRUE, FALSE)。

(3) 运算符非(!)将逻辑值反转：c(TRUE, TRUE, TRUE, TRUE, TRUE, TRUE, TRUE, FALSE, FALSE, TRUE)。

(4) leadership[c(TRUE, TRUE, TRUE, TRUE, TRUE, TRUE, TRUE, FALSE, FALSE, TRUE)]选择了逻辑值为TRUE的列，于是q3和q4被剔除了。

在知道q3和q4是第8个和第9个变量的情况下，可以使用语句：

```
newdata <- leadership[c(-8,-9)]
```

将它们剔除。这种方式的工作原理是，在某一列的下标之前加一个减号（-）就会剔除那一列。

末了，相同的变量删除工作亦可通过：

```
leadership$q3 <- leadership$q4 <- NULL
```

来完成。这回你将q3和q4两列设为了未定义（NULL）。注意，NULL与NA（表示缺失）是不同的。

丢弃变量是保留变量的逆向操作。选择哪一种方式进行变量筛选依赖于两种方式的编码难易程度。如果有许多变量需要丢弃，那么直接保留需要留下的变量可能更简单，反之亦然。

4.10.3　选入观测

选入或剔除观测（行）通常是成功的数据准备和数据分析的一个关键方面。代码清单4-6给出了一些例子。

代码清单4-6　选入观测

```
newdata <- leadership[1:3,]

newdata <- leadership[which(leadership$gender=="M" &
                            leadership$age > 30),]

attach(leadership)
newdata <- leadership[which(gender=='M' & age > 30),]
detach(leadership)
```

在以上每个示例中，你只提供了行下标，并将列下标留空（故选入了所有列）。在第一个示例中，你选择了第1行到第3行（前三个观测）。

在第二个示例中，你选择了所有30岁以上的男性。让我们拆解这行代码以便理解它。

(1) 逻辑比较leadership$gender=="M"生成了向量c(TRUE, FALSE, FALSE, TRUE, FALSE)。

(2) 逻辑比较leadership$age > 30生成了向量c(TRUE, TRUE, FALSE, TRUE, TRUE)。

(3) 逻辑比较c(TRUE, FALSE, FALSE, TRUE, TRUE) & c(TRUE, TRUE, FALSE, TRUE,

TRUE)生成了向量c(TRUE, FALSE, FALSE, TRUE, FALSE)。

(4) 函数which()给出了向量中值为TRUE元素的下标。因此，which(c(TRUE, FALSE, FALSE, TRUE, FALSE))生成了向量c(1, 4)。

(5) leadership[c(1,4),]从数据框中选择了第一个和第四个观测。这就满足了我们的选取准则（30岁以上的男性）。

第三个示例使用了attach()函数，所以你就不必在变量名前加上数据框名称了。

在本章开始的时候，我曾经提到，你可能希望将研究范围限定在2009年1月1日到2009年12月31日之间收集的观测上。怎么做呢？这里有一个办法：

```
leadership$date <- as.Date(leadership$date, "%m/%d/%y")
startdate <- as.Date("2009-01-01")
enddate   <- as.Date("2009-10-31")
newdata <- leadership[which(leadership$date >= startdate &
leadership$date <= enddate),]
```

首先，使用格式*mm/dd/yy*将开始作为字符值读入的日期转换为日期值。然后，创建开始日期和结束日期。由于as.Date()函数的默认格式就是*yyyy-mm-dd*，所以你无须在这里提供这个参数。最后，像上例一样选取那些满足你期望中准则的个案即可。

4.10.4 subset()函数

前两节中的示例很重要，因为它们辅助描述了逻辑型向量和比较运算符在R中的解释方式。理解这些例子的工作原理在总体上将有助于你对R代码的解读。既然你已经用笨办法完成了任务，现在不妨来看一种简便方法。

使用subset函数大概是选择变量和观测最简单的方法了。两个示例如下：

```
newdata <- subset(leadership, age >= 35 | age < 24,
                  select=c(q1, q2, q3, q4))

newdata <- subset(leadership, gender=="M" & age > 25,
                  select=gender:q4)
```

在第一个示例中，你选择了所有age值大于等于35或age值小于24的行，保留了变量q1到q4。在第二个示例中，你选择了所有25岁以上的男性，并保留了变量gender到q4（gender、q4和其间所有列）。你在第2章中已经看到了冒号运算符from:to。在这里，它表示了数据框中变量from到变量to包含的所有变量。

4.10.5 随机抽样

在数据挖掘和机器学习领域，从更大的数据集中抽样是很常见的做法。举例来说，你可能希望选择两份随机样本，使用其中一份样本构建预测模型，使用另一份样本验证模型的有效性。sample()函数能够让你从数据集中（有放回或无放回地）抽取大小为*n*的一个随机样本。

你可以使用以下语句从leadership数据集中随机抽取一个大小为3的样本：

```
mysample <- leadership[sample(1:nrow(leadership), 3, replace=FALSE),]
```

sample()函数中的第一个参数是一个由要从中抽样的元素组成的向量。在这里，这个向量是1到数据框中观测的数量，第二个参数是要抽取的元素数量，第三个参数表示无放回抽样。sample()函数会返回随机抽样得到的元素，之后即可用于选择数据框中的行。

更进一步

R中拥有齐全的抽样工具，包括抽取和校正调查样本（参见sampling包）以及分析复杂调查数据（参见survey包）的工具。其他依赖于抽样的方法，包括自助法和重抽样统计方法，详见第11章。

4.11　使用 SQL 语句操作数据框

到目前为止，你一直在使用R语句操作数据。但是，许多数据分析人员在接触R之前就已经精通了结构化查询语言（SQL），要丢弃那么多积累下来的知识实为一件憾事。因此，在我们结束本章之前简述一下sqldf包。（如果你对SQL不熟，请尽管跳过本节。）

在下载并安装好这个包以后（install.packages("sqldf")），你可以使用sqldf()函数在数据框上使用SQL中的SELECT语句。代码清单4-7给出了两个示例。

代码清单4-7　使用SQL语句操作数据框

```
> library(sqldf)
> newdf <- sqldf("select * from mtcars where carb=1 order by mpg",
                 row.names=TRUE)
> newdf
                mpg cyl  disp  hp drat   wt qsec vs am gear carb
Valiant        18.1   6 225.0 105 2.76 3.46 20.2  1  0    3    1
Hornet 4 Drive 21.4   6 258.0 110 3.08 3.21 19.4  1  0    3    1
Toyota Corona  21.5   4 120.1  97 3.70 2.46 20.0  1  0    3    1
Datsun 710     22.8   4 108.0  93 3.85 2.32 18.6  1  1    4    1
Fiat X1-9      27.3   4  79.0  66 4.08 1.94 18.9  1  1    4    1
Fiat 128       32.4   4  78.7  66 4.08 2.20 19.5  1  1    4    1
Toyota Corolla 33.9   4  71.1  65 4.22 1.83 19.9  1  1    4    1

> sqldf("select avg(mpg) as avg_mpg, avg(disp) as avg_disp, gear
             from mtcars where cyl in (4, 6) group by gear")
  avg_mpg avg_disp gear
1    20.3      201    3
2    24.5      123    4
3    25.4      120    5
```

第一个示例中，你从数据框mtcars中选择了所有的变量（列），保留了那些使用化油器（carb）的车型（行），按照mpg对车型进行了升序排序，并将结果保存为数据框newdf。参数row.names=TRUE将原始数据框中的行名延续到了新数据框中。在第二个示例中，你输出了四缸和六缸车型每一gear水平的mpg和disp的平均值。

经验丰富的SQL用户将会发现，sqldf包是R中一个实用的数据管理辅助工具。请参阅项目主页（http://code.google.com/p/sqldf/）以了解详情。

4.12 小结

我们在本章中讲解了大量的基础知识。我们看到了R存储缺失值和日期值的方式，并探索了它们的多种处理方法。学习了如何确定一个对象的数据类型，以及如何将它转换为其他类型。还使用简单的公式创建了新变量并重编码了现有变量。我们展示了如何对数据进行排序和对变量进行重命名，学习了如何对数据和其他数据集进行横向合并（添加变量）和纵向合并（添加观测）。最后，我们讨论了如何保留或丢弃变量，以及如何基于一系列的准则选取观测。

在下一章中，我们将着眼于R中不计其数的、用于创建和转换变量的算术函数、字符处理函数和统计函数。在探索了控制程序流程的方式之后，你将了解到如何编写自己的函数。我们也将探索如何使用这些函数来整合及概括数据。

在第5章结束时，你就能掌握管理复杂数据集的多数工具。（而且你无论走到哪里，都将成为数据分析师艳羡的人物！）

第5章 高级数据管理

5

本章内容

- 数学和统计函数
- 字符处理函数
- 循环和条件执行
- 自编函数
- 数据整合与重塑

在第4章，我们审视了R中基本的数据集处理方法，本章我们将关注一些高级话题。本章分为三个基本部分。在第一部分中，我们将快速浏览R中的多种数学、统计和字符处理函数。为了让这一部分的内容相互关联，我们先引入一个能够使用这些函数解决的数据处理问题。在讲解过这些函数以后，再为这个数据处理问题提供一个可能的解决方案。

接下来，我们将讲解如何自己编写函数来完成数据处理和分析任务。首先，我们将探索控制程序流程的多种方式，包括循环和条件执行语句。然后，我们将研究用户自编函数的结构，以及在编写完成如何调用它们。

最后，我们将了解数据的整合和概述方法，以及数据集的重塑和重构方法。在整合数据时，你可以使用任何内建或自编函数来获取数据的概述，所以你在本章前两部分中学习的内容将会派上用场。

5.1 一个数据处理难题

要讨论数值和字符处理函数，让我们首先考虑一个数据处理问题。一组学生参加了数学、科学和英语考试。为了给所有学生确定一个单一的成绩衡量指标，需要将这些科目的成绩组合起来。另外，你还想将前20%的学生评定为A，接下来20%的学生评定为B，依次类推。最后，你希望按字母顺序对学生排序。数据如表5-1所示。

观察此数据集，马上可以发现一些明显的障碍。首先，三科考试的成绩是无法比较的。由于它们的均值和标准差相去甚远，所以对它们求平均值是没有意义的。你在组合这些考试成绩之前，必须将其变换为可比较的单元。其次，为了评定等级，你需要一种方法来确定某个学生在前述得

分上百分比排名。再次，表示姓名的字段只有一个，这让排序任务复杂化了。为了正确地将其排序，需要将姓和名拆开。

表5-1 学生成绩数据

学生姓名	数 学	科 学	英 语
John Davis	502	95	25
Angela Williams	600	99	22
Bullwinkle Moose	412	80	18
David Jones	358	82	15
Janice Markhammer	495	75	20
Cheryl Cushing	512	85	28
Reuven Ytzrhak	410	80	15
Greg Knox	625	95	30
Joel England	573	89	27
Mary Rayburn	522	86	18

以上每一个任务都可以巧妙地利用R中的数值和字符处理函数完成。在讲解完下一节中的各种函数之后，我们将考虑一套可行的解决方案，以解决这项数据处理难题。

5.2 数值和字符处理函数

本节我们将综述R中作为数据处理基石的函数，它们可分为数值（数学、统计、概率）函数和字符处理函数。在阐述过每一类函数以后，我将为你展示如何将函数应用到矩阵和数据框的列（变量）和行（观测）上（参见5.2.6节）。

5.2.1 数学函数

表5-2列出了常用的数学函数和简短的用例。

表5-2 数学函数

函 数	描 述
abs(*x*)	绝对值 abs(-4)返回值为4
sqrt(*x*)	平方根sqrt(25)返回值为5 和25^(0.5)等价
ceiling(*x*)	不小于*x*的最小整数 ceiling(3.475)返回值为4
floor(*x*)	不大于*x*的最大整数 floor(3.475)返回值为3
trunc(*x*)	向0的方向截取的*x*中的整数部分 trunc(5.99)返回值为5

（续）

函　数	描　述
round(*x*, digits=*n*)	将*x*舍入为指定位的小数 round(3.475, digits=2)返回值为3.48
signif(*x*, digits=*n*)	将*x*舍入为指定的有效数字位数 signif(3.475, digits=2)返回值为3.5
cos(*x*)、sin(*x*)、tan(*x*)	余弦、正弦和正切 cos(2)返回值为 - 0.416
acos(*x*)、asin(*x*)、atan(*x*)	反余弦、反正弦和反正切 acos(-0.416)返回值为2
cosh(*x*)、sinh(*x*)、tanh(*x*)	双曲余弦、双曲正弦和双曲正切 sinh(2)返回值为3.627
Acosh(*x*)、asinh(*x*)、atanh(*x*)	反双曲余弦、反双曲正弦和反双曲正切 asinh(3.627)返回值为2
log(*x*,base=n)	对*x*取以*n*为底的对数
log(*x*)	为了方便起见
log10(*x*)	log(*x*)为自然对数 log10(*x*)为常用对数 log(10)返回值为2.3026 log10(10)返回值为1
exp(*x*)	指数函数 exp(2.3026)返回值为10

对数据做变换是这些函数的一个主要用途。例如，你经常会在进一步分析之前将收入这种存在明显偏倚的变量取对数。数学函数也被用作公式中的一部分，用于绘图函数（例如x对sin(x)）和在输出结果之前对数值做格式化。

表5-2中的示例将数学函数应用到了标量（单独的数值）上。当这些函数被应用于数值向量、矩阵或数据框时，它们会作用于每一个独立的值。例如，sqrt(c(4, 16, 25))的返回值为c(2, 4, 5)。

5.2.2　统计函数

常用的统计函数如表5-3所示，其中许多函数都拥有可以影响输出结果的可选参数。举例来说：

```
y <- mean(x)
```

提供了对象x中元素的算术平均数，而：

```
z <- mean(x, trim = 0.05, na.rm=TRUE)
```

则提供了截尾平均数，即丢弃了最大5%和最小5%的数据和所有缺失值后的算术平均数。请使用help()了解以上每个函数和其参数的用法。

表5-3 统计函数

函 数	描 述
mean(*x*)	平均数 mean(c(1,2,3,4))返回值为2.5
Median(*x*)	中位数 median(c(1,2,3,4))返回值为2.5
sd(*x*)	标准差 sd(c(1,2,3,4))返回值为1.29
var(*x*)	方差 var(c(1,2,3,4))返回值为1.67
mad(*x*)	绝对中位差（median absolute deviation） mad(c(1,2,3,4))返回值为1.48

quantile(*x*,*probs*)	求分位数。其中x为待求分位数的数值型向量，*probs*为一个由[0,1]之间的概率值组成的数值向量
	# 求x的30%和84%分位点
	y <- quantile(x, c(.3,.84))

range(*x*)	求值域 x <- c(1,2,3,4) range(x)返回值为c(1,4) diff(range(x))返回值为3
sum(*x*)	求和 sum(c(1,2,3,4))返回值为10
diff(*x*, lag=*n*)	滞后差分，lag用以指定滞后几项。默认的lag值为1 x<- c(1, 5, 23, 29) diff(x)返回值为c(4, 18, 6)
min(*x*)	求最小值 min(c(1,2,3,4))返回值为1
max(*x*)	求最大值 max(c(1,2,3,4))返回值为4
scale(*x*,center=TRUE, scale=TRUE)	为数据对象x按列进行中心化（center=TRUE）或标准化（center=TRUE,scale=TRUE）； 代码清单5-6中给出了一个示例

要了解这些函数的实战应用，请参考代码清单5-1。这段代码演示了计算某个数值向量的均值和标准差的两种方式。

代码清单5-1 | 均值和标准差的计算

```
> x <- c(1,2,3,4,5,6,7,8)

> mean(x)                    <—— 简洁的方式
[1] 4.5
> sd(x)
[1] 2.449490

> n <- length(x)             <—— 冗长的方式
> meanx <- sum(x)/n
> css <- sum((x - meanx)^2)
> sdx <- sqrt(css / (n-1))
> meanx
[1] 4.5
> sdx
[1] 2.449490
```

第二种方式中修正平方和（css）的计算过程是很有启发性的：

(1) x等于c(1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8)，x的平均值等于4.5（length(x)返回了x中元素的数量）；

(2) (x - meanx)从x的每个元素中减去了4.5，结果为c(-3.5, -2.5, -1.5, -0.5, 0.5, 1.5, 2.5, 3.5)；

(3) (x - meanx)^2将(x - meanx)的每个元素求平方，结果为c(12.25, 6.25, 2.25, 0.25, 0.25, 2.25, 6.25, 12.25)；

(4) sum((x - meanx)^2)对(x - meanx)^2)的所有元素求和，结果为42。

R中公式的写法和类似MATLAB的矩阵运算语言有着许多共同之处。（我们将在附录E中具体关注解决矩阵代数问题的方法。）

数据的标准化

默认情况下，函数scale()对矩阵或数据框的指定列进行均值为0、标准差为1的标准化：

```
newdata <- scale(mydata)
```

要对每一列进行任意均值和标准差的标准化，可以使用如下的代码：

```
newdata <- scale(mydata)*SD + M
```

其中的*M*是想要的均值，SD为想要的标准差。在非数值型的列上使用scale()函数将会报错。要对指定列而不是整个矩阵或数据框进行标准化，你可以使用这样的代码：

```
newdata <- transform(mydata, myvar = scale(myvar)*10+50)
```

此句将变量myvar标准化为均值50、标准差为10的变量。我们将在5.3节数据处理问题的解决方法中用到scale()函数。

5.2.3　概率函数

你可能在疑惑为何概率函数未和统计函数列在一起。（你真的对此有些困惑，对吧？）虽然根据定义，概率函数也属于统计类，但是它们非常独特，应独立设一节进行讲解。概率函数通常用来生成特征已知的模拟数据，以及在用户编写的统计函数中计算概率值。

在R中，概率函数形如[①]：

```
[dpqr]distribution_abbreviation()
```

其中第一个字母表示其所指分布的某一方面：

d = 密度函数（density）
p = 分布函数（distribution function）
q = 分位数函数（quantile function）
r = 生成随机数（随机偏差）

常用的概率函数列于表5-4中。

① 其中*distribution_abbreviation()*指分布名称的缩写。——译者注

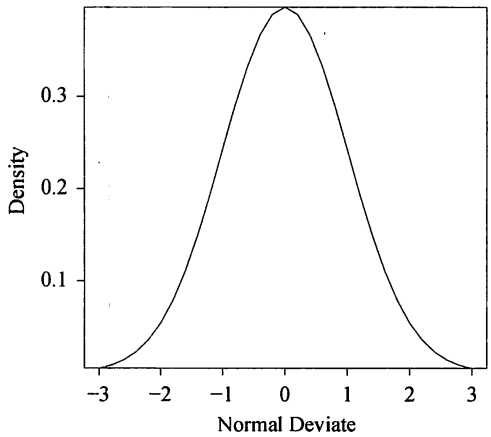
表5-4 概率分布

分布名称	缩 写	分布名称	缩 写
Beta分布	beta	Logistic分布	logis
二项分布	binom	多项分布	multinom
柯西分布	cauchy	负二项分布	nbinom
（非中心）卡方分布	chisq	正态分布	norm
指数分布	exp	泊松分布	pois
F分布	f	Wilcoxon符号秩分布	signrank
Gamma分布	gamma	t分布	t
几何分布	geom	均匀分布	unif
超几何分布	hyper	Weibull分布	weibull
对数正态分布	lnorm	Wilcoxon秩和分布	wilcox

我们不妨先看看正态分布的有关函数，以了解这些函数的使用方法。如果不指定一个均值和一个标准差，则函数将假定其为标准正态分布（均值为0，标准差为1）。密度函数（dnorm）、分布函数（pnorm）、分位数函数（qnorm）和随机数生成函数（rnorm）的使用示例见表5-5。

表5-5 正态分布函数

问 题	解 法

在区间[-3, 3]上绘制标准正态曲线 	`x <- pretty(c(-3,3), 30)`
	`y <-dnorm(x)`
	`plot(x, y,`
	`  type="l",`
	`  xlab="NormalDeviate",`
	`  ylab="Density",`
	`  yaxs="i"`
	`)`

位于 z=1.96 左侧的标准正态曲线下方面积是多少？	`pnorm(1.96)`等于0.975
均值为500，标准差为100的正态分布的0.9分位点值为多少？	`qnorm(.9, mean=500, sd=100)`等于628.16
生成50个均值为50，标准差为10的正态随机数	`rnorm(50, mean=50, sd=10)`

如果读者对绘图函数的选项不熟悉，请不要担心。这些选项在第11章中有详述。pretty()在本章稍后的表5-7中进行了解释。

1. 设定随机数种子

在每次生成伪随机数的时候，函数都会使用一个不同的种子，因此也会产生不同的结果。你可以通过函数set.seed()显式指定这个种子，让结果可以重现（reproducible）。代码清单5-2给出了一个示例。这里的函数runif()用来生成0到1区间上服从均匀分布的伪随机数。

代码清单5-2　生成服从正态分布的伪随机数

```
> runif(5)
[1] 0.8725344 0.3962501 0.6826534 0.3667821 0.9255909
> runif(5)
[1] 0.4273903 0.2641101 0.3550058 0.3233044 0.6584988
> set.seed(1234)
> runif(5)
[1] 0.1137034 0.6222994 0.6092747 0.6233794 0.8609154
> set.seed(1234)
> runif(5)
[1] 0.1137034 0.6222994 0.6092747 0.6233794 0.8609154
```

通过手动设定种子，就可以重现你的结果了。这种能力有助于我们创建会在未来取用的，以及可与他人分享的示例。

2. 生成多元正态数据

在模拟研究和蒙特卡洛方法中，你经常需要获取来自给定均值向量和协方差阵的多元正态分布的数据。MASS包中的mvrnorm()函数可以让这个问题变得很容易。其调用格式为：

```
mvrnorm(n, mean, sigma)
```

其中*n*是你想要的样本大小，*mean*为均值向量，而*sigma*是方差–协方差矩阵（或相关矩阵）。在代码清单5-3中，你将从一个参数如下所示的三元正态分布中抽取500个观测。

均值向量	230.7	146.7	3.6
协方差阵	15360.8	6721.2	-47.1
	6721.2	4700.9	-16.5
	-47.1	-16.5	0.3

代码清单5-3　生成服从多元正态分布的数据

```
> library(MASS)
> options(digits=3)
> set.seed(1234)                                  ❶ 设定随机数种子

> mean <- c(230.7, 146.7, 3.6)                    ❷ 指定均值向量、协方差阵
> sigma <- matrix(c(15360.8, 6721.2, -47.1,
                    6721.2, 4700.9, -16.5,
                     -47.1,  -16.5,   0.3), nrow=3, ncol=3)

> mydata <- mvrnorm(500, mean, sigma)             ❸ 生成数据
> mydata <- as.data.frame(mydata)
> names(mydata) <- c("y","x1","x2")
```

```
> dim(mydata)                    ◁——❹ 查看结果
[1] 500 3
> head(mydata, n=10)
       y    x1   x2
1   98.8  41.3 4.35
2  244.5 205.2 3.57
3  375.7 186.7 3.69
4  -59.2  11.2 4.23
5  313.0 111.0 2.91
6  288.8 185.1 4.18
7  134.8 165.0 3.68
8  171.7  97.4 3.81
9  167.3 101.0 4.01
10 121.1  94.5 3.76
```

代码清单5-3中设定了一个随机数种子，这样就可以在之后重现结果❶。你指定了想要的均值向量和方差-协方差阵❷，并生成了500个伪随机观测❸。为了方便，结果从矩阵转换为数据框，并为变量指定了名称。最后，你确认了拥有500个观测和3个变量，并输出了前10个观测❹。请注意，由于相关矩阵同时也是协方差阵，所以其实可以直接指定相关关系的结构。

R中的概率函数允许生成模拟数据，这些数据是从服从已知特征的概率分布中抽样而得的。近年来，依赖于模拟数据的统计方法呈指数级增长，在后续各章中会有若干示例。

5.2.4 字符处理函数

数学和统计函数是用来处理数值型数据的，而字符处理函数可以从文本型数据中抽取信息，或者为打印输出和生成报告重设文本的格式。举例来说，你可能希望将某人的姓和名连接在一起，并保证姓和名的首字母大写，抑或想统计可自由回答的调查反馈信息中含有秽语的实例（instance）数量。一些最有用的字符处理函数见表5-6。

表5-6 字符处理函数

函 数	描 述
nchar(*x*)	计算x中的字符数量 x <- c("ab", "cde", "fghij") length(x)返回值为3（参见表5-7） nchar(x[3])返回值为5
substr(*x*, *start*, *stop*)	提取或替换一个字符向量中的子串 x <- "abcdef" substr(x, 2, 4)返回值为"bcd" substr(x, 2, 4) <- "22222"(*x*将变成"a222ef")
grep(*pattern*, *x*, ignore. case=FALSE, fixed=FALSE)	在*x*中搜索某种模式。若fixed=FALSE，则*pattern*为一个正则表达式。若fixed=TRUE，则*pattern*为一个文本字符串。返回值为匹配的下标 grep("A",c("b","A","c"),fixed=TRUE)返回值为2

（续）

函　数	描　述
sub(*pattern*, *replacement*, *x*, ignore.case=FALSE, fixed=FALSE)	在*x*中搜索*pattern*，并以文本*replacement*将其替换。若fixed=FALSE，则*pattern*为一个正则表达式。若fixed=TRUE，则*pattern*为一个文本字符串 sub("\\s",".","Hello There")返回值为Hello.There。注意，"\s"是一个用来查找空白的正则表达式；使用"\\s"而不用"\"的原因是，后者是R中的转义字符（参见1.3.3节）
strsplit(*x*, *split*, fixed=FALSE)	在*split*处分割字符向量*x*中的元素。若fixed=FALSE，则*pattern*为一个正则表达式。若fixed=TRUE，则*pattern*为一个文本字符串 y <- strsplit("abc", "")将返回一个含有1个成分、3个元素的列表，包含的内容为"a" "b" "c" unlist(y)[2]和sapply(y, "[", 2)均会返回"b"
paste(…, sep="")	连接字符串，分隔符为sep paste("x", 1:3,sep="")返回值为c("x1", "x2", "x3") paste("x",1:3,sep="M")返回值为c("xM1","xM2" "xM3") paste("Today is", date())返回值为Today is Thu Jun 25 14:17:32 2011（我修改了日期以让它看起来更接近当前的时间）
toupper(*x*)	大写转换 toupper("abc")返回值为"ABC"
tolower(*x*)	小写转换 tolower("ABC")返回值为"abc"

请注意，函数grep()、sub()和strsplit()能够搜索某个文本字符串（fixed=TRUE）或某个正则表达式（fixed=FALSE，默认值为FALSE）。正则表达式为文本模式的匹配提供了一套清晰而简练的语法。例如，正则表达式：

```
^[hc]?at
```

可匹配任意以0个或1个h或c开头、后接at的字符串。因此，此表达式可以匹配hat、cat和at，但不会匹配bat。要了解更多，请参考维基百科的*regular expression*（正则表达式）条目。

5.2.5　其他实用函数

表5-7中的函数对于数据管理和处理同样非常实用，只是它们无法清楚地划入其他分类中。

表5-7　其他实用函数

函　数	描　述
length(*x*)	对象x的长度 x <- c(2, 5, 6, 9) length(x)返回值为4

（续）

函　数	描　述
seq(*from*, *to*, *by*)	生成一个序列 indices <- seq(1,10,2) indices的值为c(1, 3, 5, 7, 9)
rep(*x*, *n*)	将*x*重复*n*次 y <- rep(1:3, 2) y的值为c(1, 2, 3, 1, 2, 3)
cut(*x*, *n*)	将连续型变量*x*分割为有着*n*个水平的因子 使用选项ordered_result = TRUE以创建一个有序型因子
pretty(*x*, *n*)	创建美观的分割点。通过选取*n*+1个等间距的取整值，将一个连续型变量*x*分割为*n*个区间。绘图中常用
cat(… , file ="myfile", append =FALSE)	连接…中的对象，并将其输出到屏幕上或文件中（如果声明了一个的话） firstname <- c("Jane") cat("Hello" ,firstname, "\n")

表中的最后一个例子演示了在输出时转义字符的使用方法。\n表示新行，\t为制表符，\'为单引号，\b为退格，等等。（键入?Quotes以了解更多。）例如，代码：

```
name <- "Bob"
cat( "Hello", name, "\b.\n", "Isn\'t R", "\t", "GREAT?\n")
```

可生成：

```
Hello Bob.
 Isn't R         GREAT?
```

请注意第二行缩进了一个空格。当cat输出连接后的对象时，它会将每一个对象都用空格分开。这就是在句号之前使用退格转义字符（\b）的原因。不然，生成的结果将是“Hello Bob .”。

在数值、字符串和向量上使用我们最近学习的函数是直观而明确的，但是如何将它们应用到矩阵和数据框上呢？这就是下一节的主题。

5.2.6 将函数应用于矩阵和数据框

R函数的诸多有趣特性之一，就是它们可以应用到一系列的数据对象上，包括标量、向量、矩阵、数组和数据框。代码清单5-4提供了一个示例。

代码清单5-4 将函数应用于数据对象

```
> a <- 5
> sqrt(a)
[1] 2.236068
> b <- c(1.243, 5.654, 2.99)
> round(b)
[1] 1 6 3
> c <- matrix(runif(12), nrow=3)
> c
       [,1]  [,2]  [,3]  [,4]
[1,] 0.4205 0.355 0.699 0.323
```

```
[2,] 0.0270 0.601 0.181 0.926
[3,] 0.6682 0.319 0.599 0.215
> log(c)
       [,1]   [,2]   [,3]   [,4]
[1,] -0.866 -1.036 -0.358 -1.130
[2,] -3.614 -0.508 -1.711 -0.077
[3,] -0.403 -1.144 -0.513 -1.538
> mean(c)
[1] 0.444
```

请注意，在代码清单5-4中对矩阵c求均值的结果为一个标量（0.444）。函数mean()求得的是矩阵中全部12个元素的均值。但如果希望求的是各行的均值或各列的均值呢？

R中提供了一个apply()函数，可将一个任意函数“应用”到矩阵、数组、数据框的任何维度上。apply函数的使用格式为：

```
apply(x, MARGIN, FUN, ...)
```

其中，*x*为数据对象，*MARGIN*是维度的下标，*FUN*是由你指定的函数，而...则包括了任何想传递给*FUN*的参数。在矩阵或数据框中，MARGIN=1表示行，MARGIN=2表示列。请看代码清单5-5中的例子。

代码清单5-5　将一个函数应用到矩阵的所有行（列）

```
> mydata <- matrix(rnorm(30), nrow=6)
> mydata
         [,1]   [,2]    [,3]   [,4]   [,5]
[1,]  0.71298  1.368 -0.8320 -1.234 -0.790
[2,] -0.15096 -1.149 -1.0001 -0.725  0.506
[3,] -1.77770  0.519 -0.6675  0.721 -1.350
[4,] -0.00132 -0.308  0.9117 -1.391  1.558
[5,] -0.00543  0.378 -0.0906 -1.485 -0.350
[6,] -0.52178 -0.539 -1.7347  2.050  1.569
> apply(mydata, 1, mean)
[1] -0.155 -0.504 -0.511  0.154 -0.310  0.165
> apply(mydata, 2, mean)
[1] -0.2907  0.0449 -0.5688 -0.3442  0.1906
> apply(mydata, 2, mean, trim=0.2)
[1] -0.1699  0.0127 -0.6475 -0.6575  0.2312
```

❶ 生成数据

❷ 计算每行的均值

❸ 计算每列的均值

❹ 计算每列的截尾均值

首先生成了一个包含正态随机数的6×5矩阵❶。然后你计算了6行的均值❷，以及5列的均值❸。最后，你计算了每列的截尾均值（在本例中，截尾均值基于中间60%的数据，最高和最低20%的值均被忽略）❹。

FUN可为任意R函数，这也包括你自行编写的函数（参见5.4节），所以apply()是一种很强大的机制。apply()可把函数应用到数组的某个维度上，而lapply()和sapply()则可将函数应用到列表（list）上。你将在下一节中看到sapply（它是lapply的更好用的版本）的一个示例。

你已经拥有了解决5.1节中数据处理问题所需的所有工具，现在，让我们小试身手。

5.3 数据处理难题的一套解决方案

5.1节中提出的问题是：将学生的各科考试成绩组合为单一的成绩衡量指标、基于相对名次（前20%，下20%，等等）给出从A到F的评分、根据学生姓氏和名字的首字母对花名册进行排序。代码清单5-6给出了一种解决方案。

代码清单5-6 示例的一种解决方案

```
> options(digits=2)

> Student <- c("John Davis", "Angela Williams", "Bullwinkle Moose",
               "David Jones", "Janice Markhammer", "Cheryl Cushing",
               "Reuven Ytzrhak", "Greg Knox", "Joel England",
               "Mary Rayburn")
> Math <- c(502, 600, 412, 358, 495, 512, 410, 625, 573, 522)
> Science <- c(95, 99, 80, 82, 75, 85, 80, 95, 89, 86)
> English <- c(25, 22, 18, 15, 20, 28, 15, 30, 27, 18)
> roster <- data.frame(Student, Math, Science, English,
                       stringsAsFactors=FALSE)

> z <- scale(roster[,2:4])
> score <- apply(z, 1, mean)
> roster <- cbind(roster, score)
> y <- quantile(score, c(.8,.6,.4,.2))
> roster$grade[score >= y[1]] <- "A"
> roster$grade[score < y[1] & score >= y[2]] <- "B"
> roster$grade[score < y[2] & score >= y[3]] <- "C"
> roster$grade[score < y[3] & score >= y[4]] <- "D"
> roster$grade[score < y[4]] <- "F"

> name <- strsplit((roster$Student), " ")
> lastname <- sapply(name, "[", 2)
> firstname <- sapply(name, "[", 1)
> roster <- cbind(firstname,lastname, roster[,-1])

> roster <- roster[order(lastname,firstname),]

> roster
    Firstname   Lastname Math Science English score grade
6      Cheryl    Cushing  512      85      28  0.35     C
1        John      Davis  502      95      25  0.56     B
9        Joel    England  573      89      27  0.70     B
4       David      Jones  358      82      15 -1.16     F
8        Greg       Knox  625      95      30  1.34     A
5      Janice Markhammer  495      75      20 -0.63     D
3  Bullwinkle      Moose  412      80      18 -0.86     D
10       Mary    Rayburn  522      86      18 -0.18     C
2      Angela   Williams  600      99      22  0.92     A
7      Reuven    Ytzrhak  410      80      15 -1.05     F
```

计算综合得分

对学生评分

抽取姓氏和名字

根据姓氏和名字排序

以上代码写得比较紧凑，逐步分解如下。

步骤1 原始的学生花名册已经给出了。`options(digits=2)`限定了输出小数点后数字的

位数，并且让输出更容易阅读。

```
> options(digits=2)
> roster
              Student Math Science English
1           John Davis  502      95      25
2      Angela Williams  600      99      22
3     Bullwinkle Moose  412      80      18
4          David Jones  358      82      15
5    Janice Markhammer  495      75      20
6       Cheryl Cushing  512      85      28
7       Reuven Ytzrhak  410      80      15
8            Greg Knox  625      95      30
9         Joel England  573      89      27
10        Mary Rayburn  522      86      18
```

步骤2　由于数学、科学和英语考试的分值不同（均值和标准差相去甚远），在组合之前需要先让它们变得可以比较。一种方法是将变量进行标准化，这样每科考试的成绩就都是用单位标准差来表示，而不是以原始的尺度来表示了。这个过程可以使用scale()函数来实现：

```
> z <- scale(roster[,2:4])
> z
        Math Science English
 [1,]  0.013   1.078   0.587
 [2,]  1.143   1.591   0.037
 [3,] -1.026  -0.847  -0.697
 [4,] -1.649  -0.590  -1.247
 [5,] -0.068  -1.489  -0.330
 [6,]  0.128  -0.205   1.137
 [7,] -1.049  -0.847  -1.247
 [8,]  1.432   1.078   1.504
 [9,]  0.832   0.308   0.954
[10,]  0.243  -0.077  -0.697
```

步骤3　然后，可以通过函数mean()来计算各行的均值以获得综合得分，并使用函数cbind()将其添加到花名册中：

```
> score <- apply(z, 1, mean)
> roster <- cbind(roster, score)
> roster
              Student   Math  Science English  score
1           John Davis  502      95      25    0.559
2      Angela Williams  600      99      22    0.924
3     Bullwinkle Moose  412      80      18   -0.857
4          David Jones  358      82      15   -1.162
5    Janice Markhammer  495      75      20   -0.629
6       Cheryl Cushing  512      85      28    0.353
7       Reuven Ytzrhak  410      80      15   -1.048
8            Greg Knox  625      95      30    1.338
9         Joel England  573      89      27    0.698
10        Mary Rayburn  522      86      18   -0.177
```

步骤4　函数quantile()给出了学生综合得分的百分位数。可以看到，成绩为A的分界点为0.74，B的分界点为0.44，等等。

```
> y <- quantile(roster$score, c(.8,.6,.4,.2))
> y
  80%   60%   40%   20%
 0.74  0.44 -0.36 -0.89
```

步骤5 通过使用逻辑运算符，你可以将学生的百分位数排名重编码为一个新的类别型成绩变量。下面在数据框roster中创建了变量grade。

```
> roster$grade[score >= y[1]] <- "A"
> roster$grade[score < y[1] & score >= y[2]] <- "B"
> roster$grade[score < y[2] & score >= y[3]] <- "C"
> roster$grade[score < y[3] & score >= y[4]] <- "D"
> roster$grade[score < y[4]] <- "F"
> roster
              Student Math Science English  score grade
1          John Davis  502      95      25  0.559     B
2     Angela Williams  600      99      22  0.924     A
3    Bullwinkle Moose  412      80      18 -0.857     D
4         David Jones  358      82      15 -1.162     F
5   Janice Markhammer  495      75      20 -0.629     D
6      Cheryl Cushing  512      85      28  0.353     C
7      Reuven Ytzrhak  410      80      15 -1.048     F
8           Greg Knox  625      95      30  1.338     A
9        Joel England  573      89      27  0.698     B
10       Mary Rayburn  522      86      18 -0.177     C
```

步骤6 你将使用函数strsplit()以空格为界把学生姓名拆分为姓氏和名字。把strsplit()应用到一个字符串组成的向量上会返回一个列表：

```
> name <- strsplit((roster$Student), " ")
> name

[[1]]
[1] "John"   "Davis"

[[2]]
[1] "Angela"    "Williams"

[[3]]
[1] "Bullwinkle" "Moose"

[[4]]
[1] "David" "Jones"

[[5]]
[1] "Janice"      "Markhammer"

[[6]]
[1] "Cheryl"   "Cushing"

[[7]]
[1] "Reuven"   "Ytzrhak"

[[8]]
[1] "Greg" "Knox"
```

```
[[9]]
[1] "Joel"    "England"

[[10]]
[1] "Mary"    "Rayburn"
```

步骤7　你可以使用函数sapply()提取列表中每个成分的第一个元素，放入一个储存名字的向量，并提取每个成分的第二个元素，放入一个储存姓氏的向量。"["是一个可以提取某个对象的一部分的函数——在这里它是用来提取列表name各成分中的第一个或第二个元素的。你将使用cbind()把它们添加到花名册中。由于已经不再需要student变量，可以将其丢弃（在下标中使用-1）。

```
> Firstname <- sapply(name, "[", 1)
> Lastname <- sapply(name, "[", 2)
> roster <- cbind(Firstname, Lastname, roster[,-1])
> roster
    Firstname   Lastname Math Science English  score grade
1        John      Davis  502      95      25  0.559     B
2      Angela   Williams  600      99      22  0.924     A
3  Bullwinkle      Moose  412      80      18 -0.857     D
4       David      Jones  358      82      15 -1.162     F
5      Janice Markhammer  495      75      20 -0.629     D
6      Cheryl    Cushing  512      85      28  0.353     C
7      Reuven    Ytzrhak  410      80      15 -1.048     F
8        Greg       Knox  625      95      30  1.338     A
9        Joel    England  573      89      27  0.698     B
10       Mary    Rayburn  522      86      18 -0.177     C
```

步骤8　最后，可以使用函数order()依姓氏和名字对数据集进行排序：

```
> roster[order(Lastname,Firstname),]
    Firstname   Lastname  Math  Science  English  score   grade
6      Cheryl    Cushing  512      85       28     0.35     C
1        John      Davis  502      95       25     0.56     B
9        Joel    England  573      89       27     0.70     B
4       David      Jones  358      82       15    -1.16     F
8        Greg       Knox  625      95       30     1.34     A
5      Janice Markhammer  495      75       20    -0.63     D
3  Bullwinkle      Moose  412      80       18    -0.86     D
10       Mary    Rayburn  522      86       18    -0.18     C
2      Angela   Williams  600      99       22     0.92     A
7      Reuven    Ytzrhak  410      80       15    -1.05     F
```

瞧！小事一桩！

完成这些任务的方式有许多，只是以上代码体现了相应函数的设计初衷。现在到了学习控制结构和自己编写函数的时候了。

5.4　控制流

在正常情况下，R程序中的语句是从上至下顺序执行的。但有时你可能希望重复执行某些语句，仅在满足特定条件的情况下执行另外的语句。这就是控制流结构发挥作用的地方了。

R拥有一般现代编程语言中都有的标准控制结构。首先你将看到用于条件执行的结构，接下来是用于循环执行的结构。

为了理解贯穿本节的语法示例，请牢记以下概念：

- *语句*（statement）是一条单独的R语句或一组复合语句（包含在花括号{ } 中的一组R语句，使用分号分隔）；
- *条件*（cond）是一条最终被解析为真（TRUE）或假（FALSE）的表达式；
- *表达式*（expr）是一条数值或字符串的求值语句；
- *序列*（seq）是一个数值或字符串序列。

在讨论过控制流的构造后，我们将学习如何编写函数。

5.4.1 重复和循环

循环结构重复地执行一个或一系列语句，直到某个条件不为真为止。循环结构包括for和while结构。

1. for结构

for循环重复地执行一个语句，直到某个变量的值不再包含在序列seq中为止。语法为：

```
for (var in seq) statement
```

在下例中：

```
for (i in 1:10)  print("Hello")
```

单词Hello被输出了10次。

2. while结构

while循环重复地执行一个语句，直到条件不为真为止。语法为：

```
while (cond) statement
```

作为第二个例子，代码：

```
i <- 10
while (i > 0) {print("Hello"); i <- i - 1}
```

又将单词Hello输出了10次。请确保括号内while的条件语句能够改变，即让它在某个时刻不再为真——否则循环将永不停止！在上例中，语句：

```
i <- i - 1
```

在每步循环中为对象i减去1，这样在十次循环过后，它就不再大于0了。反之，如果在每步循环都加1的话，R将不停地输出Hello。这也是while循环可能较其他循环结构更危险的原因。

在处理大数据集中的行和列时，R中的循环可能比较低效费时。只要可能，最好联用R中的内建数值/字符处理函数和apply族函数。

5.4.2 条件执行

在条件执行结构中，一条或一组语句仅在满足一个指定条件时执行。条件执行结构包括if-else、ifelse和switch。

1. if-else结构

控制结构if-else在某个给定条件为真时执行语句。也可以同时在条件为假时执行另外的语句。语法为：

```
if (cond) statement
if (cond) statement1 else statement2
```

示例如下：

```
if (is.character(grade)) grade <- as.factor(grade)
if (!is.factor(grade)) grade <- as.factor(grade) else print("Grade already
    is a factor")
```

在第一个实例中，如果grade是一个字符向量，它就会被转换为一个因子。在第二个实例中，两个语句择其一执行。如果grade不是一个因子（注意符号！），它就会被转换为一个因子。如果它是一个因子，就会输出一段信息。

2. ifelse结构

ifelse结构是if-else结构比较紧凑的向量化版本，其语法为：

```
ifelse(cond, statement1, statement2)
```

若*cond*为TRUE，则执行第一个语句；若*cond*为FALSE，则执行第二个语句。示例如下：

```
ifelse(score > 0.5, print("Passed"), print("Failed"))
outcome <- ifelse (score > 0.5, "Passed", "Failed")
```

在程序的行为是二元时，或者希望结构的输入和输出均为向量时，请使用ifelse。

3. switch结构

switch根据一个表达式的值选择语句执行。语法为：

```
switch(expr, ....)
```

其中的...表示与*expr*的各种可能输出值绑定的语句。通过观察代码清单5-7中的代码，可以轻松地理解switch的工作原理。

代码清单5-7　一个switch示例

```
> feelings <- c("sad", "afraid")
> for (i in feelings)
    print(
      switch(i,
        happy  = "I am glad you are happy",
        afraid = "There is nothing to fear",
        sad    = "Cheer up",
        angry  = "Calm down now"
      )
    )

[1] "Cheer up"
[1] "There is nothing to fear"
```

虽然这个例子比较幼稚，但它展示了switch的主要功能。你将在下一节学习如何使用switch编写自己的函数。

5.5 用户自编函数

R的最大优点之一就是用户可以自行添加函数。事实上，R中的许多函数都是由已有函数构成的。一个函数的结构看起来大致如此：

```
myfunction <- function(arg1, arg2, ... ){
  statements
  return(object)
}
```

函数中的对象只在函数内部使用。返回对象的数据类型是任意的，从标量到列表皆可。让我们看一个示例。

假设你想编写一个函数，用来计算数据对象的集中趋势和散布情况。此函数应当可以选择性地给出参数统计量（均值和标准差）和非参数统计量（中位数和绝对中位差）。结果应当以一个含名称列表的形式给出。另外，用户应当可以选择是否自动输出结果。除非另外指定，否则此函数的默认行为应当是计算参数统计量并且不输出结果。代码清单5-8给出了一种解答。

代码清单5-8 mystats()：一个由用户编写的描述性统计量计算函数

```
mystats <- function(x, parametric=TRUE, print=FALSE) {
  if (parametric) {
    center <- mean(x); spread <- sd(x)
  } else {
    center <- median(x); spread <- mad(x)
  }
  if (print & parametric) {
    cat("Mean=", center, "\n", "SD=", spread, "\n")
  } else if (print & !parametric) {
    cat("Median=", center, "\n", "MAD=", spread, "\n")
  }
  result <- list(center=center, spread=spread)
  return(result)
}
```

要看此函数的实战情况，首先需要生成一些数据（服从正态分布的，大小为500的随机样本）：

```
set.seed(1234)
x <- rnorm(500)
```

在执行语句：

```
y <- mystats(x)
```

之后，y$center将包含均值（0.00184），y$spread将包含标准差（1.03），并且没有输出结果。如果执行语句：

```
y <- mystats(x, parametric=FALSE, print=TRUE)
```

y$center将包含中位数（－0.0207），y$spread将包含绝对中位差（1.001）。另外，还会输出以下结果：

```
Median= -0.0207
MAD= 1
```

下面让我们看一个使用了switch结构的用户自编函数，此函数可让用户选择输出当天日期的格式。在函数声明中为参数指定的值将作为其默认值。在函数mydate()中，如果未指定type，则long将为默认的日期格式：

```
mydate <- function(type="long") {
  switch(type,
    long =  format(Sys.time(), "%A %B %d %Y"),
    short = format(Sys.time(), "%m-%d-%y"),
    cat(type, "is not a recognized type\n")
   )
}
```

实战中的函数如下：

```
> mydate("long")
[1] "Thursday December 02 2010"
> mydate("short")
[1] "12-02-10"
> mydate()
[1] "Thursday December 02 2010"
> mydate("medium")
medium is not a recognized type
```

请注意，函数cat()仅会在输入的日期格式类型不匹配"long"或"short"时执行。使用一个表达式来捕获错误输入的参数值通常来说是一个好主意。

有若干函数可以用来为函数添加错误捕获和纠正功能。你可以使用函数warning()来生成一条错误提示信息，用message()来生成一条诊断信息，或用stop()停止当前表达式的执行并提示错误。请参阅每个函数的在线帮助文档以了解详细用法。

小提示　一旦开始编写无论任何长度和复杂度的函数，优秀调试工具的重要性都会凸显出来。R中有许多实用的内建调试函数，也有许多用户贡献包提供了额外的功能。关于这个话题，一份优秀的参考资料是Duncan Murdoch整理的“Debugging in R”（http://www.stats.uwo.ca/faculty/murdoch/software/debuggingR）。

在创建好自己的函数以后，你可能希望在每个会话中都能直接使用它们。附录B描述了如何定制R环境，以使R启动时自动读取用户编写的函数。我们将在第6章和第8章中看到更多的用户自编函数示例。

你可以使用本节中提供的基本技术完成很多工作。如果你想要探索编写函数的微妙之处，或编写可以分发给他人使用的专业级代码，个人推荐两本优秀的书籍，你可在本书末尾的参考文献部分找到：Venables & Ripley（2000）以及Chambers（2008）。这两本书共同提供了大量细节和众多示例。

函数的编写就讲到这里，我们将以对数据整合和重塑的讨论来结束本章。

5.6 整合与重构

R中提供了许多用来整合（aggregate）和重塑（reshape）数据的强大方法。在整合数据时，往往将多组观测替换为根据这些观测计算的描述性统计量。在重塑数据时，则会通过修改数据的结构（行和列）来决定数据的组织方式。本节描述了用来完成这些任务的多种方式。

在接下来的两个小节中，我们将使用已包含在R基本安装中的数据框mtcars。这个数据集是从*Motor Trend* 杂志（1974）提取的，它描述了34种车型的设计和性能特点（汽缸数、排量、马力、每加仑汽油行驶的英里数，等等）。要了解此数据集的更多信息，请参阅help(mtcars)。

5.6.1 转置

转置（反转行和列）也许是重塑数据集的众多方法中最简单的一个了。使用函数t()即可对一个矩阵或数据框进行转置。对于后者，行名将成为变量（列）名。代码清单5-9展示了一个例子。

代码清单5-9 数据集的转置

```
> cars <- mtcars[1:5,1:4]
> cars
                   mpg cyl disp  hp
Mazda RX4         21.0   6  160 110
Mazda RX4 Wag     21.0   6  160 110
Datsun 710        22.8   4  108  93
Hornet 4 Drive    21.4   6  258 110
Hornet Sportabout 18.7   8  360 175
> t(cars)
     Mazda RX4 Mazda RX4 Wag Datsun 710 Hornet 4 Drive Hornet Sportabout
mpg         21            21       22.8           21.4              18.7
cyl          6             6        4.0            6.0               8.0
disp       160           160      108.0          258.0             360.0
hp         110           110       93.0          110.0             175.0
```

为了节约空间，代码清单5-9仅使用了mtcars数据集的一个子集。在本节稍后讲解reshape包的时候，你将看到一种更为灵活的数据转置方式。

5.6.2 整合数据

在R中使用一个或多个by变量和一个预先定义好的函数来折叠（collapse）数据是比较容易的。调用格式为：

```
aggregate(x, by, FUN)
```

其中*x*是待折叠的数据对象，*by*是一个变量名组成的列表，这些变量将被去掉以形成新的观测，而*FUN*则是用来计算描述性统计量的标量函数，它将被用来计算新观测中的值。

作为一个示例，我们将根据汽缸数和挡位数整合mtcars数据，并返回各个数值型变量的均值（见代码清单5-10）。

代码清单5-10　整合数据

```
> options(digits=3)
> attach(mtcars)
> aggdata <-aggregate(mtcars, by=list(cyl,gear), FUN=mean, na.rm=TRUE)
> aggdata
  Group.1 Group.2  mpg cyl disp  hp drat   wt qsec  vs   am gear carb
1       4       3 21.5   4  120  97 3.70 2.46 20.0 1.0 0.00    3 1.00
2       6       3 19.8   6  242 108 2.92 3.34 19.8 1.0 0.00    3 1.00
3       8       3 15.1   8  358 194 3.12 4.10 17.1 0.0 0.00    3 3.08
4       4       4 26.9   4  103  76 4.11 2.38 19.6 1.0 0.75    4 1.50
5       6       4 19.8   6  164 116 3.91 3.09 17.7 0.5 0.50    4 4.00
6       4       5 28.2   4  108 102 4.10 1.83 16.8 0.5 1.00    5 2.00
7       6       5 19.7   6  145 175 3.62 2.77 15.5 0.0 1.00    5 6.00
8       8       5 15.4   8  326 300 3.88 3.37 14.6 0.0 1.00    5 6.00
```

在结果中，Group.1表示汽缸数量（4、6或8），Group.2代表挡位数（3、4或5）。举例来说，拥有4个汽缸和3个挡位车型的每加仑汽油行驶英里数（mpg）均值为21.5。

在使用aggregate()函数的时候，by中的变量必须在一个列表中（即使只有一个变量）。你可以在列表中为各组声明自定义的名称，例如by=list(Group.cyl=cyl, Group.gears=gear)。指定的函数可为任意的内建或自编函数，这就为整合命令赋予了强大的力量。但说到力量，没有什么可以比reshape包更强。

5.6.3　reshape包

reshape包[①]是一套重构和整合数据集的绝妙的万能工具。由于它的这种万能特性，可能学起来会有一点难度。我们将慢慢地梳理整个过程，并使用一个小型数据集作为示例，这样每一步发生了什么就很清晰了。由于reshape包并未包含在R的标准安装中，在第一次使用它之前需要使用install.packages("reshape")进行安装。

大致说来，你需要首先将数据“融合”（melt），以使每一行都是一个唯一的标识符-变量组合。然后将数据“重铸”（cast）为你想要的任何形状。在重铸过程中，你可以使用任何函数对数据进行整合。将使用的数据集如表5-8所示。

表5-8　原始数据集（mydata）

ID	Time	X1	X2
1	1	5	6
1	2	3	5
2	1	6	1
2	2	2	4

① 由同一作者开发的reshape2包是reshape的重新设计版本，功能更为强大。——译者注

在这个数据集中，测量（measurement）是指最后两列中的值（5、6、3、5、6、1、2、4）。每个测量都能够被标识符变量（在本例中，标识符是指ID、Time以及观测属于X1还是X2）唯一地确定。举例来说，在知道ID为1、Time为1，以及属于变量X1之后，即可确定测量值为第一行中的5。

1. 融合

数据集的融合是将它重构为这样一种格式：每个测量变量独占一行，行中带有要唯一确定这个测量所需的标识符变量。要融合表5-8中的数据，可使用以下代码：

```
library(reshape)
md <- melt(mydata, id=(c("id", "time")))
```

你将得到如表5-9所示的结构。

表5-9 融合后的数据集

ID	Time	变　量	值
1	1	X1	5
1	2	X1	3
2	1	X1	6
2	2	X1	2
1	1	X2	6
1	2	X2	5
2	1	X2	1
2	2	X2	4

注意，必须指定要唯一确定每个测量所需的变量（ID和Time），而表示测量变量名的变量（X1或X2）将由程序为你自动创建。

既然已经拥有了融合后的数据，现在就可以使用cast()函数将它重铸为任意形状了。

2. 重铸

cast()函数读取已融合的数据，并使用你提供的公式和一个（可选的）用于整合数据的函数将其重塑。调用格式为：

```
newdata <- cast(md, formula, FUN)
```

其中的*md*为已融合的数据，*formula*描述了想要的最后结果，而*FUN*是（可选的）数据整合函数。其接受的公式形如：

```
rowvar1 + rowvar2 + … ~ colvar1 + colvar2 + …
```

在这一公式中，*rowvar1 + rowvar2 + ...*定义了要划掉的变量集合，以确定各行的内容，而*colvar1 + colvar2 + ...*则定义了要划掉的、确定各列内容的变量集合。参见图5-1中的示例。

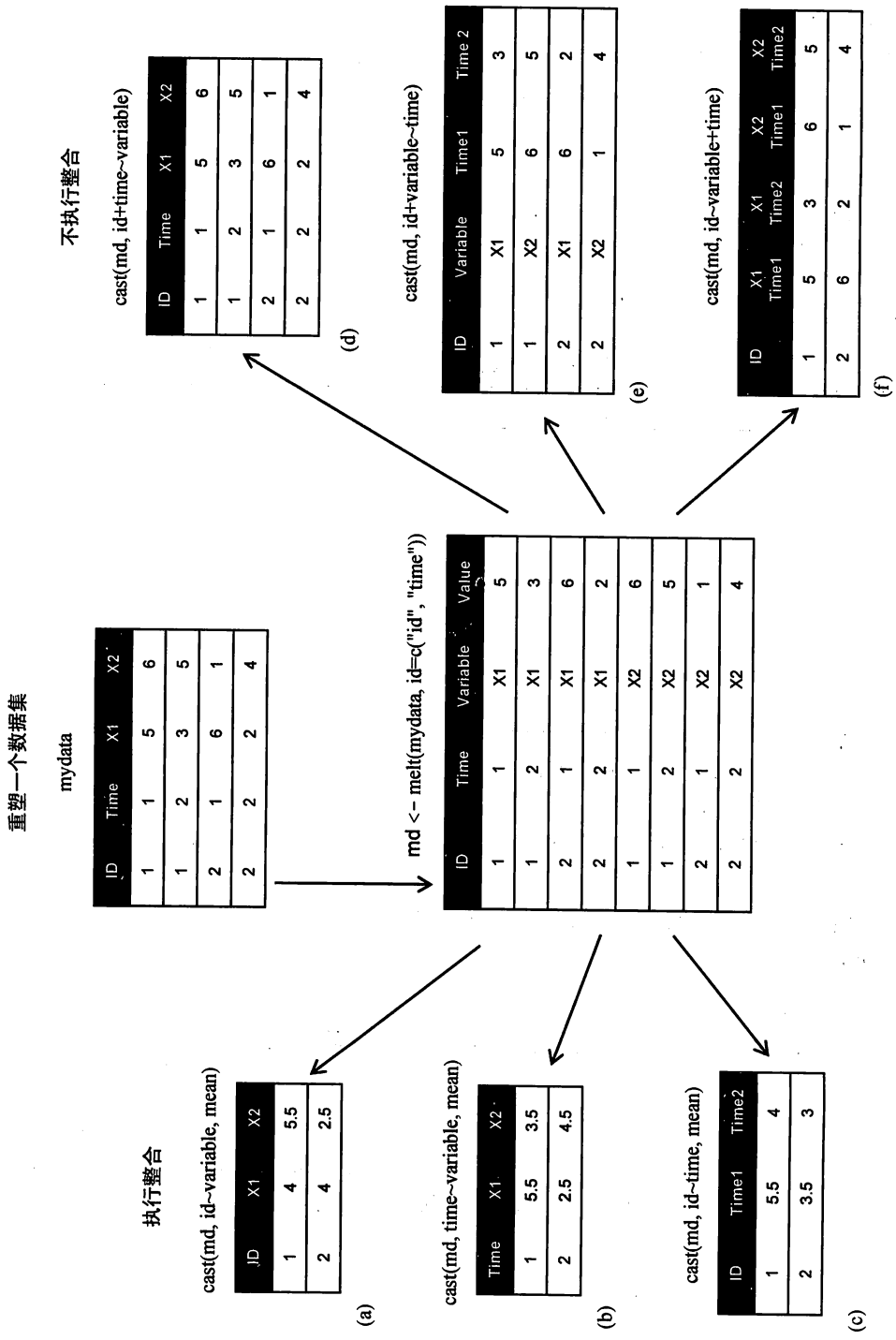


图5-1　使用函数melt()和cast()重塑数据

由于右侧（d、e和f）的公式中并未包括某个函数，所以数据仅被重塑了。反之，左侧的示例（a、b和c）中指定了mean作为整合函数，从而就对数据同时进行了重塑与整合。例如，(a)中给出了每个观测所有时刻中在X1和X2上的均值；示例(b)则给出了X1和X2在时刻1和时刻2的均值，对不同的观测进行了平均；在(c)中则是每个观测在时刻1和时刻2的均值，对不同的X1和X2进行了平均。

如你所见，函数melt()和cast()提供了令人惊叹的灵活性。很多时候，你不得不在进行分析之前重塑或整合数据。举例来说，在分析重复测量数据（为每个观测记录了多个测量的数据）时，你通常需要将数据转化为类似于表5-9中所谓的“长格式”。示例参见9.6节。

5.7 小结

本章总结了数十种用于处理数据的数学、统计和概率函数。我们看到了如何将这些函数应用到范围广泛的数据对象上，其中包括向量、矩阵和数据框。我们学习了控制流结构的使用方法：用循环重复执行某些语句，或用分支在满足某些特定条件时执行另外的语句。然后你编写了自己的函数，并将它们应用到了数据上。最后，我们探索了折叠、整合以及重构数据的多种方法。

既然已经集齐了数据塑形（没有别的意思）所需的工具，我们就准备好告别第一部分并进入激动人心的数据分析世界了！在接下来的几章中，我们将探索多种将数据转化为信息的统计方法和图形方法。

Part 2 第二部分

基本方法

在第一部分中，我们探索了 R 环境，并讨论了如何从广泛的数据源导入数据、如何组合和变换数据，以及如何将数据准备为适合进一步分析的形式。在导入和清理完数据后，下一步通常就是逐个探索每个变量了。这将为你提供每个变量分布的信息，对理解样本的特征、识别意外的或有问题的值，以及选择合适的统计方法都是有帮助的。接下来是每次研究变量子集中的两个变量。这一步可以揭示变量间的基本关系，并且对于建立更复杂的模型来说是有益的第一步。

第二部分关注的是用于获取数据基本信息的图形技术和统计方法。第 6 章描述了可视化单个变量分布的方法。对于类别型变量，有条形图、饼图以及比较新的扇形图。对于数值型变量，有直方图、密度图、箱线图、点图和不那么著名的小提琴图（violin plot）。每类图形对于理解单个变量的分布都是有益的。

第 7 章描述了用于概述单变量和双变量间关系的统计方法。这一章使用了一个完整的数据集，以数值型数据的描述性统计分析开始，研究了感兴趣的子集。接下来，它描述了用于概述类别型数据的频数分布表和列联表。这一章以那些用于理解两个变量之间关系的方法作结，包括二元相关关系的探索、卡方检验、t 检验，以及非参数方法。

在读完第二部分以后，你将能够使用 R 中的基本图形和统计方法来描述数据、探索组间差异，并识别变量间那些显著的关系。

第6章 基本图形

6

本章内容

- 条形图、箱线图和点图
- 饼图和扇形图
- 直方图与核密度图

我们无论在何时分析数据，第一件要做的事情就是观察它。对于每个变量，哪些值是最常见的？值域是大是小？是否有不寻常的观测？R中提供了丰富的数据可视化函数。本章，我们将关注那些可以帮助理解单个类别型或连续型变量的图形。主题包括：

- 将变量的分布作可视化展示；
- 通过结果变量进行跨组比较。

在以上话题中，变量可为连续型（例如，以每加仑汽油行驶的英里数表示的里程数）或类别型（例如，以无改善、一定程度的改善或明显改善表示的治疗结果）。在后续各章中，我们将探索那些展示双变量和多变量间关系的图形。

在接下来的几节中，我们将探索条形图、饼图、扇形图、直方图、核密度图、箱线图、小提琴图和点图的用法。有些图形可能你已经很熟悉了，而有些图形（如扇形图或小提琴图）可能你比较陌生。我们的目标同往常一样，都是更好地理解数据，并能够与他人沟通这些理解方式。

让我们从条形图开始。

6.1 条形图

条形图通过垂直的或水平的条形展示了类别型变量的分布（频数）。函数`barplot()`的最简单用法是：

```
barplot(height)
```

其中的*height*是一个向量或一个矩阵。

在接下来的示例中，我们将绘制一项探索类风湿性关节炎新疗法研究的结果。数据已包含在随`vcd`包分发的`Arthritis`数据框中。由于`vcd`包并没用包括在R的默认安装中，请确保在第一次使用之前先下载并安装它（`install. packages("vcd")`）。

注意，我们并不需要使用vcd包来创建条形图。我们读入它的原因是为了使用Arthritis数据集。但我们需要使用vcd包创建6.1.5节中描述的棘状图（spinogram）。

6.1.1 简单的条形图

若*height*是一个向量，则它的值就确定了各条形的高度，并将绘制一幅垂直的条形图。使用选项horiz=TRUE则会生成一幅水平条形图。你也可以添加标注选项。选项main可添加一个图形标题，而选项xlab和ylab则会分别添加x轴和y轴标签。

在关节炎研究中，变量Improved记录了对每位接受了安慰剂或药物治疗的病人的治疗结果。

```
> library(vcd)
> counts <- table(Arthritis$Improved)
> counts
  None   Some Marked
    42     14     28
```

这里我们看到，28位病人有了明显改善，14人有部分改善，而42人没有改善。我们将在第7章更充分地讨论使用table()函数提取各单元的计数的方法。

你可以使用一幅垂直或水平的条形图来绘制变量counts。代码见代码清单6-1，结果如图6-1所示。

代码清单6-1 简单的条形图

```
barplot(counts,                                   ← 简单条形图
        main="Simple Bar Plot",
        xlab="Improvement", ylab="Frequency")

barplot(counts,                                   ← 水平条形图
        main="Horizontal Bar Plot",
        xlab="Frequency", ylab="Improvement",
        horiz=TRUE)
```

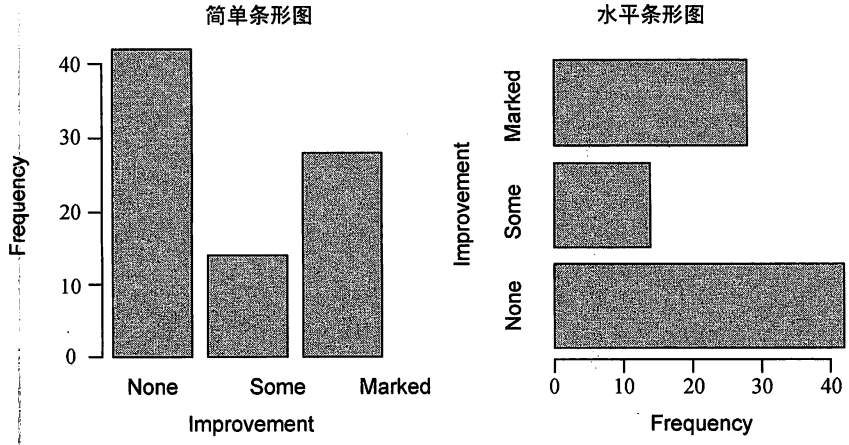


图6-1 简单的垂直条形图和水平条形图

小提示　若要绘制的类别型变量是一个因子或有序型因子，就可以使用函数plot()快速创建一幅垂直条形图。由于Arthritis$Improved是一个因子，所以代码：

```
plot(Arthritis$Improved, main="Simple Bar Plot",
     xlab="Improved", ylab="Frequency")
plot(Arthritis$Improved, horiz=TRUE, main="Horizontal Bar Plot",
     xlab="Frequency", ylab="Improved")
```

将和代码清单6-1生成相同的条形图，而无需使用table()函数将其表格化。

如果标签很长怎么办？在6.1.4节中，你将看到微调标签的方法，这样它们就不会重叠了。

6.1.2　堆砌条形图和分组条形图

如果*height*是一个矩阵而不是一个向量，则绘图结果将是一幅堆砌条形图或分组条形图。若beside=FALSE（默认值），则矩阵中的每一列都将生成图中的一个条形，各列中的值将给出堆砌的“子条”的高度。若beside=TRUE，则矩阵中的每一列都表示一个分组，各列中的值将并列而不是堆砌。

考虑治疗类型和改善情况的列联表：

```
> library(vcd)
> counts <- table(Arthritis$Improved, Arthritis$Treatment)
> counts
        Treatment
Improved Placebo Treated
  None        29      13
  Some         7       7
  Marked       7      21
```

你可以将此结果绘制为一幅堆砌条形图或一幅分组条形图（见代码清单6-2）。结果如图6-2所示。

代码清单6-2　堆砌条形图和分组条形图

```
barplot(counts,                                          ◁—— 堆砌条形图
        main="Stacked Bar Plot",
        xlab="Treatment", ylab="Frequency",
        col=c("red", "yellow","green"),
        legend=rownames(counts))

barplot(counts,                                          ◁—— 分组条形图
        main="Grouped Bar Plot",
        xlab="Treatment", ylab="Frequency",
        col=c("red", "yellow", "green"),
        legend=rownames(counts), beside=TRUE)
```

第一个barplot函数绘制了一幅堆砌条形图，而第二个绘制了一幅分组条形图。我们同时使用col选项为绘制的条形添加了颜色。参数legend.text为图例提供了各条形的标签（仅在height为一个矩阵时有用）。

在第3章中，我们讲解过格式化和放置图例的方法，以确保最好的效果。请试着重新排布图例的位置以避免它们和条形产生叠加。

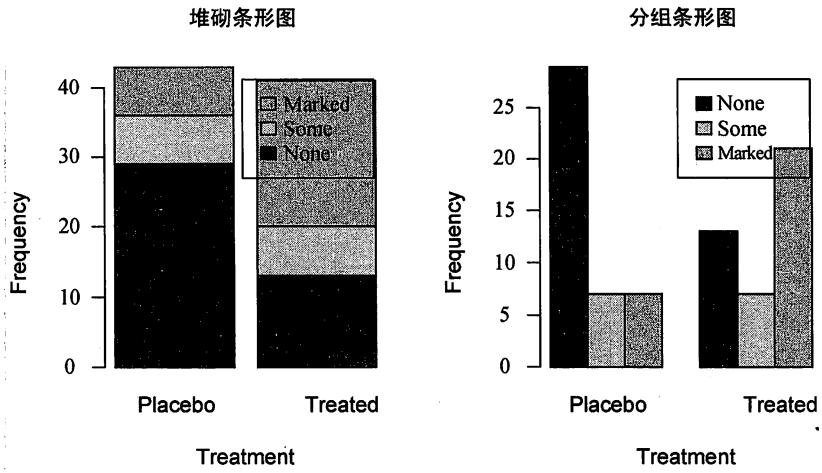


图6-2 堆砌条形图和分组条形图

6.1.3 均值条形图

条形图并不一定要基于计数数据或频率数据。你可以使用数据整合函数并将结果传递给barplot()函数，来创建表示均值、中位数、标准差等的条形图。代码清单6-3展示了一个示例，结果如图6-3所示。

代码清单6-3 排序后均值的条形图

```
> states <- data.frame(state.region, state.x77)
> means <- aggregate(states$Illiteracy, by=list(state.region), FUN=mean)
> means
        Group.1    x
1     Northeast 1.00
2         South 1.74
3 North Central 0.70
4          West 1.02
> means <- means[order(means$x),]
> means
        Group.1    x
3 North Central 0.70
1     Northeast 1.00
4          West 1.02
2         South 1.74
> barplot(means$x, names.arg=means$Group.1)
> title("Mean Illiteracy Rate")
```

❶ 将均值从小到大排序

❷ 添加标题

代码清单6-3将均值从小到大排序❶。同时注意，使用title()函数❷与调用plot()时添加main选项是等价的。means$x是包含各条形高度的向量，而添加选项names.arg=means$Group.1是为了展示标签。

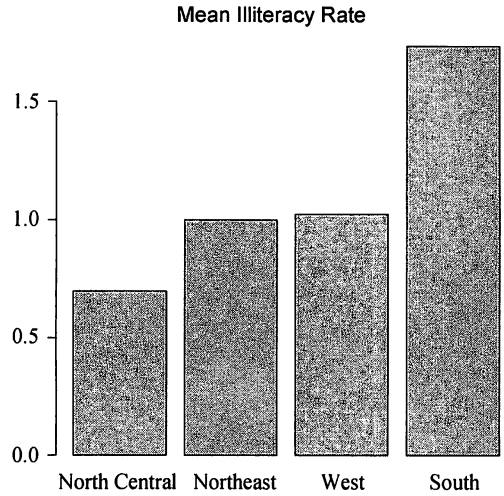


图6-3　美国各地区平均文盲率排序的条形图

你可以进一步完善这个示例。各个条形可以使用lines()函数绘制的线段连接起来。你也可以使用gplots包中的barplot2()函数创建叠加有置信区间的均值条形图。R Graph Gallery网站（http://addictedtor.free.fr/graphiques）上的“barplot2: Enhanced Bar Plots”页面可以作为一个参考示例。

6.1.4　条形图的微调

有若干种方式可以微调条形图的外观。例如，随着条数的增多，条形的标签可能会开始重叠。你可以使用参数cex.names来减小字号。将其指定为小于1的值可以缩小标签的大小。可选的参数names.arg允许你指定一个字符向量作为条形的标签名。你同样可以使用图形参数辅助调整文本间隔。代码清单6-4给出了一个示例，输出如图6-4所示。

代码清单6-4　为条形图搭配标签

```
par(mar=c(5,8,4,2))
par(las=2)
counts <- table(Arthritis$Improved)

barplot(counts,
        main="Treatment Outcome",
        horiz=TRUE, cex.names=0.8,
      names.arg=c("No Improvement", "Some Improvement",
                  "Marked Improvement"))
```

本例中，我们（使用las=2）旋转了条形的标签、修改了标签文本，并（使用mar）增加了y边界的大小，为了让标签更合适，（使用cex.names=0.8）缩小了字体大小。par()函数能够让你对R的默认图形做出大量修改。详情参阅第3章。

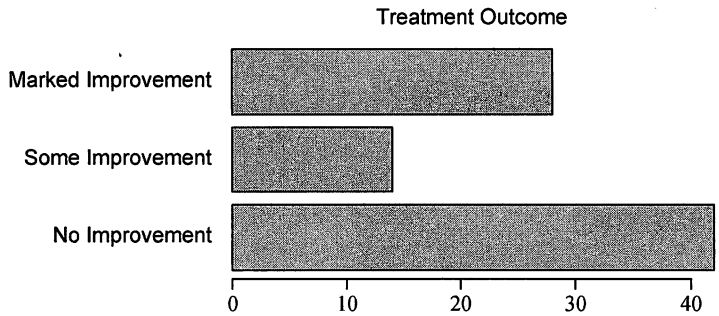


图6-4 微调了标签的垂直条形图

6.1.5 棘状图

在结束关于条形图的讨论之前，让我们再来看一种特殊的条形图，它称为棘状图（spinogram）。棘状图对堆砌条形图进行了重缩放，这样每个条形的高度均为1，每一段的高度即表示比例。棘状图可由vcd包中的函数spine()绘制。以下代码可以生成一幅简单的棘状图：

```
library(vcd)
attach(Arthritis)
counts <- table(Treatment, Improved)
spine(counts, main="Spinogram Example")
detach(Arthritis)
```

输出如图6-5所示。治疗组同安慰剂组相比，获得显著改善的患者比例明显更高。

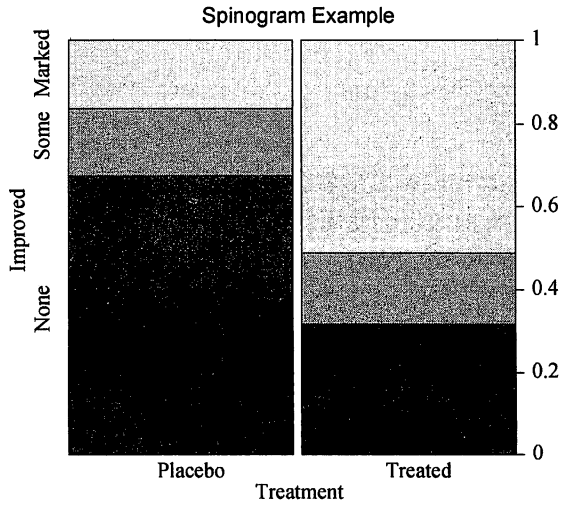


图6-5 关节炎治疗结果的棘状图

除了条形图，饼图也是一种用于展示类别型变量分布的流行工具，接下来讨论它。

6.2 饼图

饼图在商业世界中无所不在，然而多数统计学家，包括相应R文档的编写者却都对它持否定态度。相对于饼图，他们更推荐使用条形图或点图，因为相对于面积，人们对长度的判断更精确。也许由于这个原因，R中饼图的选项与其他统计软件相比十分有限。

饼图可由以下函数创建：

```
pie(x, labels)
```

其中*x*是一个非负数值向量，表示每个扇形的面积，而*labels*则是表示各扇形标签的字符型向量。代码清单6-5给出了四个示例，结果如图6-6所示。

代码清单6-5　饼图

```
par(mfrow=c(2, 2))
slices <- c(10, 12,4, 16, 8)
lbls <- c("US", "UK", "Australia", "Germany", "France")

pie(slices, labels = lbls,
    main="Simple Pie Chart")

pct <- round(slices/sum(slices)*100)
lbls2 <- paste(lbls, " ", pct, "%", sep="")
pie(slices, labels=lbls2, col=rainbow(length(lbls2)),
    main="Pie Chart with Percentages")

library(plotrix)
pie3D(slices, labels=lbls,explode=0.1,
      main="3D Pie Chart ")

mytable <- table(state.region)
lbls3 <- paste(names(mytable), "\n", mytable, sep="")
pie(mytable, labels = lbls3,
    main="Pie Chart from a Table\n (with sample sizes)")
```

❶ 将四幅图形组合为一幅

❷ 为饼图添加比例数值

❸ 从表格创建饼图

首先，你做了图形设置，这样四幅图形就会被组合为一幅❶。（多幅图形的组合在第3章中介绍过。）然后，你输入了前三幅图形将会使用的数据。

对于第二幅饼图❷，你将样本数转换为比例值，并将这项信息添加到了各扇形的标签上。如第3章所述，第二幅饼图使用rainbow()函数定义了各扇形的颜色。这里的rainbow(length(lbls2))将被解析为rainbow(5)，即为图形提供了五种颜色。

第三幅是使用plotrix包中的pie3D()函数创建的三维饼图。请在第一次使用之前先下载并安装这个包。如果说统计学家们只是不喜欢饼图的话，那么他们对三维饼图的态度就一定是唾弃了（即使他们私下感觉三维饼图好看）。这是因为三维效果无法增进对数据的理解，并且被认为是分散注意力的视觉花瓶。

第四幅图演示了如何从表格创建饼图❸。在本例中，你计算了美国不同地区的州数，并在绘制图形之前将此信息附加到了标签上。

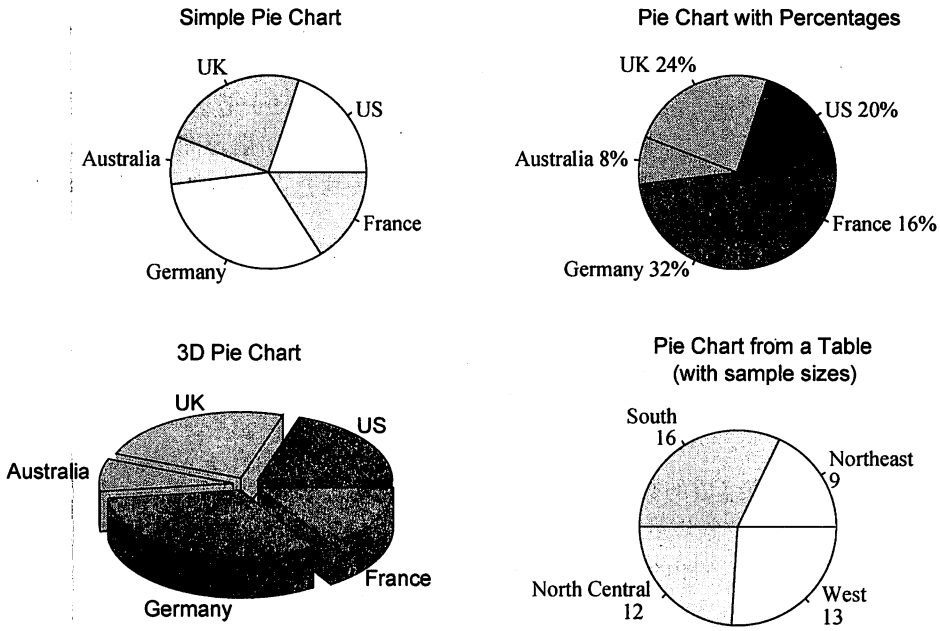


图6-6 饼图示例

饼图让比较各扇形的值变得困难（除非这些值被附加在标签上）。例如，观察（第一幅）最简单的饼图，你能分辨出美国（US）和德国（Germany）的大小吗？（如果你可以，说明你的洞察力比我好。）为改善这种状况，我们创造了一种称为扇形图（fan plot）的饼图变种。扇形图（Lemon & Tyagi，2009）为用户提供了一种同时展示相对数量和相互差异的方法。在R中，扇形图是通过plotrix包中的fan.plot()函数实现的。

考虑以下代码和结果图（图6-7）：

```
library(plotrix)
slices <- c(10, 12,4, 16, 8)
lbls <- c("US", "UK", "Australia", "Germany", "France")
fan.plot(slices, labels = lbls, main="Fan Plot")
```

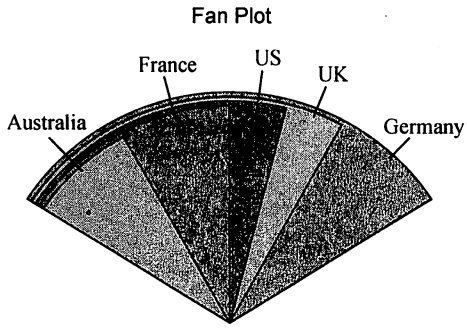


图6-7 国别数据的扇形图

在一幅扇形图中，各个扇形相互叠加，并对半径做了修改，这样所有扇形就都是可见的。在这里可见德国对应的扇形是最大的，而美国的扇形大小约为其60%。法国的扇形大小似乎是德国的一半，是澳大利亚的两倍。请记住，在这里扇形的宽度（*width*）是重要的，而半径并不重要。

如你所见，确定扇形图中扇形的相对大小比饼图要简单得多。扇形图虽然尚未普及，但它仍然是新生力量。既然已经讲完了饼图和扇形图，就让我们转到直方图上吧。与条形图和饼图不同，直方图描述的是连续型变量的分布。

6.3　直方图

直方图通过在X轴上将值域分割为一定数量的组，在Y轴上显示相应值的频数，展示了连续型变量的分布。可以使用如下函数创建直方图：

```
hist(x)
```

其中的x是一个由数据值组成的数值向量。参数freq=FALSE表示根据概率密度而不是频数绘制图形。参数breaks用于控制组的数量。在定义直方图中的单元时，默认将生成等距切分。代码清单6-6提供了绘制四种直方图的代码，绘制结果见图6-8。

代码清单6-6　直方图

```
par(mfrow=c(2,2))

hist(mtcars$mpg)                    ❶ 简单直方图

hist(mtcars$mpg,                                          ❷ 指定组数和颜色
     breaks=12,
     col="red",
     xlab="Miles Per Gallon",
     main="Colored histogram with 12 bins")

hist(mtcars$mpg,                                          ❸ 添加轴须图
     freq=FALSE,
     breaks=12,
     col="red",
     xlab="Miles Per Gallon",
     main="Histogram, rug plot, density curve")
rug(jitter(mtcars$mpg))
lines(density(mtcars$mpg), col="blue", lwd=2)

x <- mtcars$mpg                     ❹ 添加正态密度曲线和外框
h<-hist(x,
        breaks=12,
        col="red",
        xlab="Miles Per Gallon",
        main="Histogram with normal curve and box")
xfit<-seq(min(x), max(x), length=40)
yfit<-dnorm(xfit, mean=mean(x), sd=sd(x))
yfit <- yfit*diff(h$mids[1:2])*length(x)
lines(xfit, yfit, col="blue", lwd=2)
box()
```

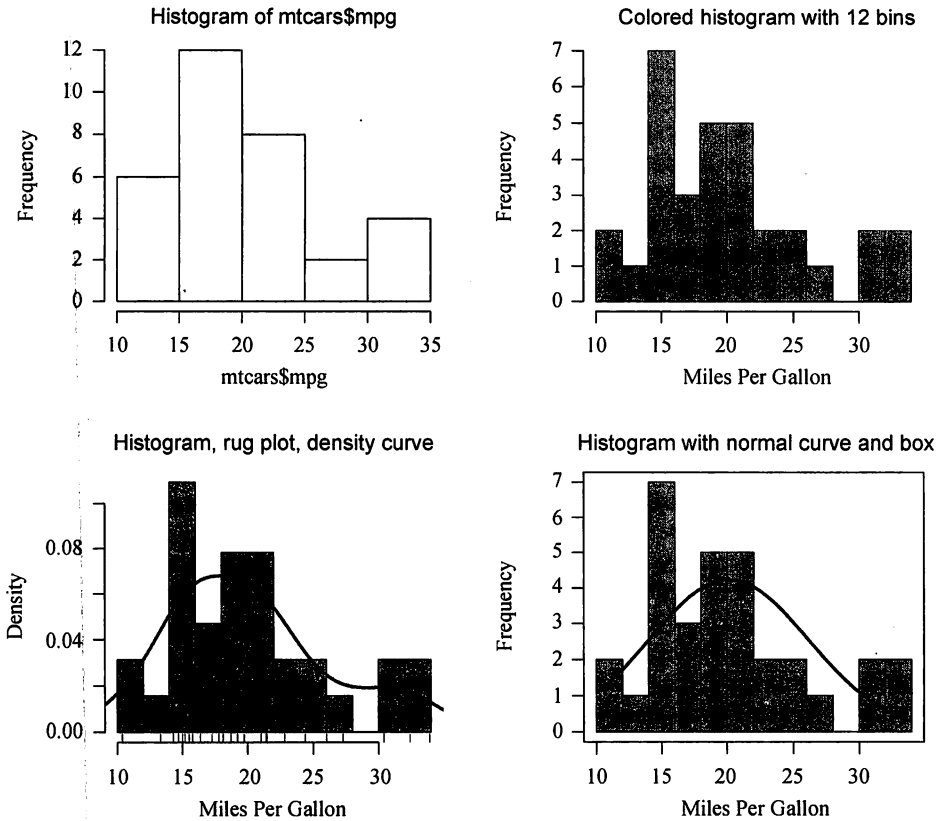


图6-8 直方图示例

第一幅直方图❶展示了未指定任何选项时的默认图形。这个例子共创建了五个组，并且显示了默认的标题和坐标轴标签。对于第二幅直方图❷，我们将组数指定为12，使用红色填充条形，并添加了更吸引人、更具信息量的标签和标题。

第三幅直方图❸保留了上一幅图中的颜色、组数、标签和标题设置，又叠加了一条密度曲线和轴须图（rug plot）。这条密度曲线是一个核密度估计，会在下节中描述。它为数据的分布提供了一种更加平滑的描述。我们使用`lines()`函数叠加了这条蓝色、双倍默认线条宽度的曲线。最后，轴须图是实际数据值的一种一维呈现方式。如果数据中有许多结[①]，你可以使用如下代码将轴须图的数据打散：

```
rug(jitter(mtcars$mpag, amount=0.01))
```

这样将向每个数据点添加一个小的随机值（一个±amount之间的均匀分布随机数），以避免重叠的点产生影响。

第四幅直方图❹与第二幅类似，只是拥有一条叠加在上面的正态曲线和一个将图形围绕起来

① 数据中出现相同的值，称为结（tie）。——译者注

的盒型。用于叠加正态曲线的代码来源于R-help邮件列表上由Peter Dalgaard发表的建议。盒型是使用box()函数生成的。

6.4　核密度图

在上节中，你看到了直方图上叠加的核密度图。用术语来说，核密度估计是用于估计随机变量概率密度函数的一种非参数方法。虽然其数学细节已经超出了本书的范畴，但从总体上讲，核密度图不失为一种用来观察连续型变量分布的有效方法。绘制密度图的方法（不叠加到另一幅图上方）为：

```
Plot(density(x))
```

其中的x是一个数值型向量。由于plot()函数会创建一幅新的图形，所以要向一幅已经存在的图形上叠加一条密度曲线，可以使用lines()函数（如代码清单6-6所示）。

代码清单6-7给出了两幅核密度图示例，结果如图6-9所示。

代码清单6-7　核密度图

```
par(mfrow=c(2,1))
d <- density(mtcars$mpg)

plot(d)

d <- density(mtcars$mpg)
plot(d, main="Kernel Density of Miles Per Gallon")
polygon(d, col="red", border="blue")
rug(mtcars$mpg, col="brown")
```

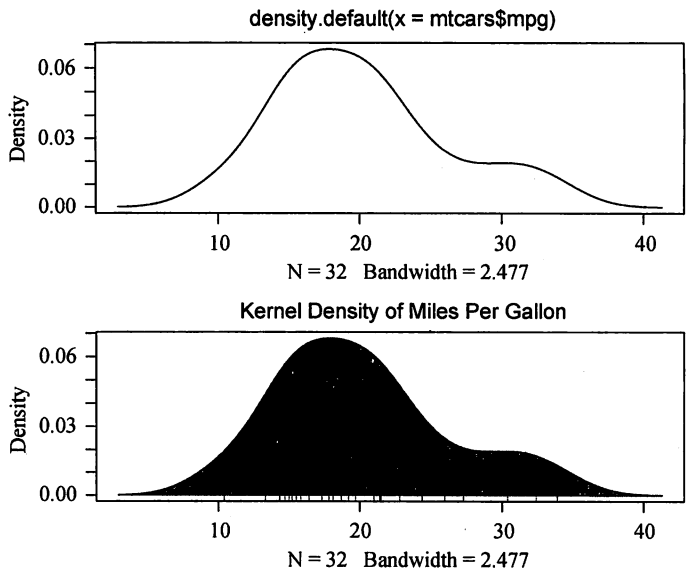


图6-9　核密度图

在第一幅图中，你看到的是完全使用默认设置创建的最简图形。在第二幅图中，你添加了一个标题，将曲线修改为蓝色，使用实心红色填充了曲线下方的区域，并添加了棕色的轴须图。polygon()函数根据顶点的x和y坐标（本例中由density()函数提供）绘制了多边形。

核密度图可用于比较组间差异。可能是由于普遍缺乏方便好用的软件，这种方法其实完全没有被充分利用。幸运的是，sm包漂亮地填补了这一缺口。

使用sm包中的sm.density.compare()函数可向图形叠加两组或更多的核密度图。使用格式为：

```
sm.density.compare(x, factor)
```

其中的x是一个数值型向量，factor是一个分组变量。请在第一次使用sm包之前先安装它。代码清单6-8中提供了一个示例，它比较了拥有4个、6个或8个汽缸车型的每加仑汽油行驶英里数。

代码清单6-8 可比较的核密度图

```
par(lwd=2)
library(sm)
attach(mtcars)

cyl.f <- factor(cyl, levels= c(4,6,8),
                labels = c("4 cylinder", "6 cylinder",
                           "8 cylinder"))

sm.density.compare(mpg, cyl, xlab="Miles Per Gallon")
title(main="MPG Distribution by Car Cylinders")

colfill<-c(2:(1+length(levels(cyl.f))))
legend(locator(1), levels(cyl.f), fill=colfill)

detach(mtcars)
```

❶ 双倍线条宽度

❷ 创建分组因子

❸ 绘制密度图

❹ 通过鼠标单击添加图例

par()函数将所绘制的线条设置为双倍宽度（lwd=2），这样它们在书中就会更易读❶。接下来载入了sm包，并绑定了数据框mtcars。

在数据框mtcars❷中，变量cyl是一个以4、6或8编码的数值型变量。为了向图形提供值的标签，这里cyl转换为名为cyl.f的因子。函数sm.density.compare()创建了图形❸，一条title()语句添加了主标题。

最后，添加了一个图例以增加可解释性❹。（图例已在第3章介绍。）首先创建的是一个颜色向量，这里的colfill值为c(2, 3, 4)。然后通过legend()函数向图形上添加一个图例。第一个参数值locator(1)表示用鼠标点击想让图例出现的位置来交互式地放置这个图例。第二个参数值则是由标签组成的字符向量。第三个参数值使用向量colfill为cyl.f的每一个水平指定了一种颜色。结果如图6-10所示。

如你所见，核密度图的叠加不失为一种在某个结果变量上跨组比较观测的强大方法。你可以看到不同组所含值的分布形状，以及不同组之间的重叠程度。（这段话的寓意是，我的下一辆车将是四缸的——或是一辆电动的。）

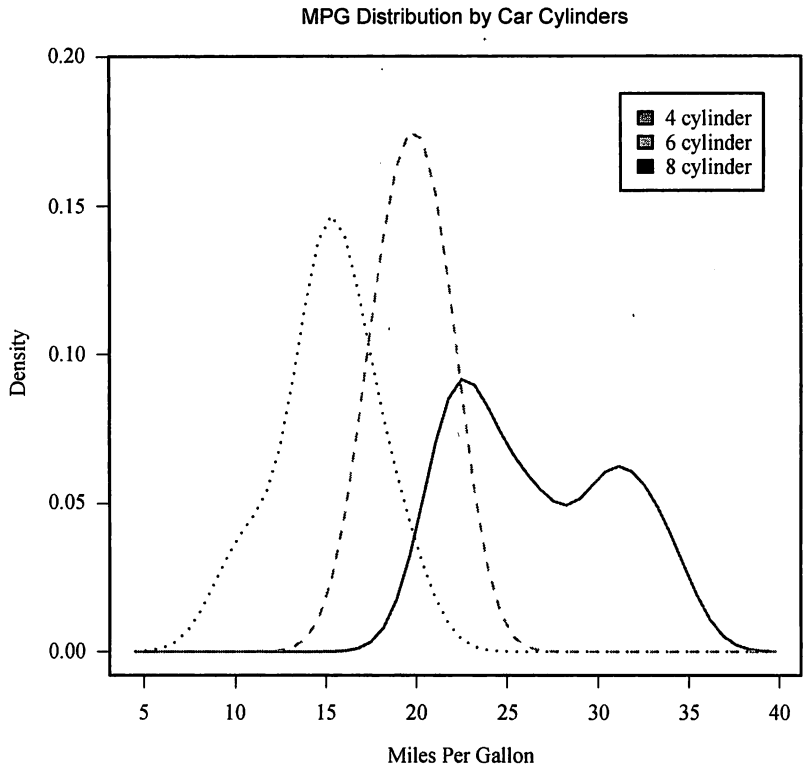


图6-10　按汽缸个数划分的各车型每加仑汽油行驶英里数的核密度图

箱线图同样是一项用来可视化分布和组间差异的绝佳图形手段（并且更常用），我们接下来讨论它。

6.5　箱线图

箱线图（又称盒须图）通过绘制连续型变量的五数总括，即最小值、下四分位数（第25百分位数）、中位数（第50百分位数）、上四分位数（第75百分位数）以及最大值，描述了连续型变量的分布。箱线图能够显示出可能为离群点（范围±1.5*IQR以外的值，IQR表示四分位距，即上四分位数与下四分位数的差值）的观测。例如：

```
boxplot(mtcars$mpg, main="Box plot", ylab="Miles per Gallon")
```

生成了如图6-11所示的图形。为了图解各个组成部分，我手工添加了标注。

默认情况下，两条须的延伸极限不会超过盒型各端加1.5倍四分位距的范围。此范围以外的值将以点来表示（在这里没有画出）。

举例来说，在我们的车型样本中，每加仑汽油行驶英里数的中位数是19.2，50%的值都落在了15.3和22.8之间，最小值为10.4，最大值为33.9。我是如何从图中如此精确地读出了这些值呢？

执行boxplot.stats(mtcars$mpg)即可输出用于构建图形的统计量（换句话说，我作弊了）。图中似乎不存在离群点，而且略微正偏（上侧的须较下侧的须更长）。

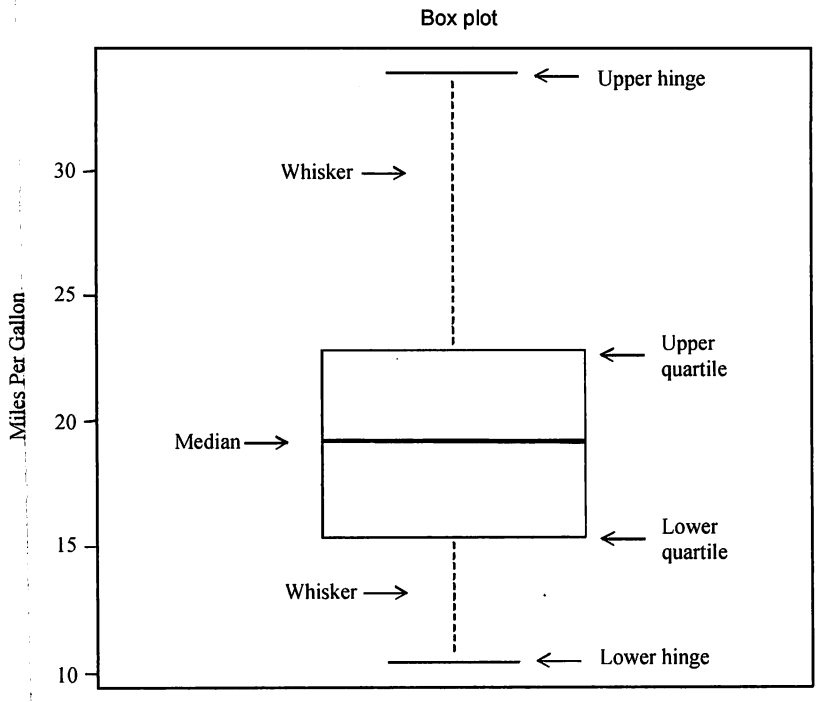


图6-11 含手工标注的箱线图

6.5.1 使用并列箱线图进行跨组比较

箱线图可以展示单个变量或分组变量。使用格式为：

```
boxplot(formula, data=dataframe)
```

其中的*formula*是一个公式，*dataframe*代表提供数据的数据框（或列表）。一个示例公式为y ~ A，这将为类别型变量A的每个值并列地生成数值型变量y的箱线图。公式y ~ A*B则将为类别型变量A和B所有水平的两两组合生成数值型变量y的箱线图。

添加参数varwidth=TRUE将使箱线图的宽度与其样本大小的平方根成正比。参数horizontal=TRUE可以反转坐标轴的方向。

在以下代码中，我们使用并列箱线图重新研究了四缸、六缸、八缸发动机对每加仑汽油行驶的英里数的影响。结果如图6-12所示。

```
boxplot(mpg ~ cyl, data=mtcars,
        main="Car Mileage Data",
        xlab="Number of Cylinders",
        ylab="Miles Per Gallon")
```

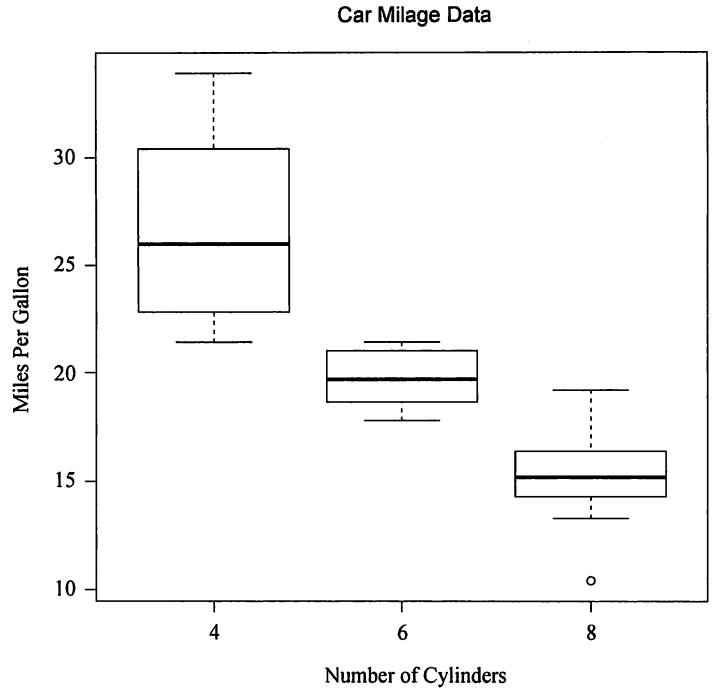


图6-12　不同汽缸数量车型油耗的箱线图

在图6-12中可以看到不同组间油耗的区别非常明显。同时也可以发现，六缸车型的每加仑汽油行驶的英里数分布较其他两类车型更为均匀。与六缸和八缸车型相比，四缸车型的每加仑汽油行驶的英里数散布最广（且正偏）。在八缸组还有一个离群点。

箱线图灵活多变，通过添加notch=TRUE，可以得到含凹槽的箱线图。若两个箱的凹槽互不重叠，则表明它们的中位数有显著差异（Chambers et al., 1983, p. 62）。以下代码将为我们的车型油耗示例创建一幅含凹槽的箱线图：

```
boxplot(mpg ~ cyl, data=mtcars,
        notch=TRUE,
        varwidth=TRUE,
        col="red",
        main="Car Mileage Data",
        xlab="Number of Cylinders",
        ylab="Miles Per Gallon")
```

参数col以红色填充了箱线图，而varwidth=TRUE则使箱线图的宽度与它们各自的样本大小成正比。

在图6-13中可以看到，四缸、六缸、八缸车型的油耗中位数是不同的。随着汽缸数的减少，油耗明显降低。

最后，你可以为多个分组因子绘制箱线图。代码清单6-9为不同缸数和不同变速箱类型的车型绘制了每加仑汽油行驶英里数的箱线图。同样地，这里使用参数col为箱线图进行了着色。请

注意颜色的循环使用。在本例中，共有六幅箱线图和两种指定的颜色，所以颜色将重复使用三次。

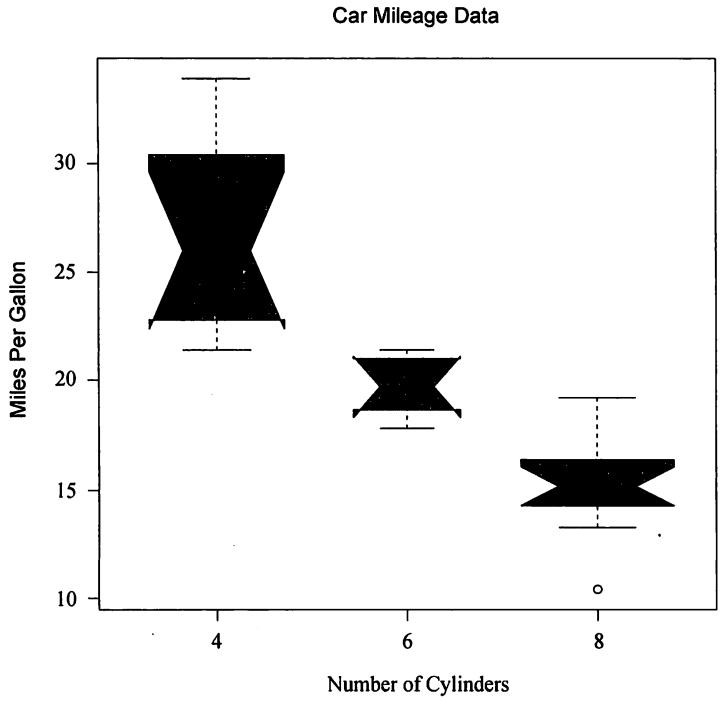


图6-13 不同汽缸数量车型油耗的含凹槽箱线图

代码清单6-9 两个交叉因子的箱线图

```
mtcars$cyl.f <- factor(mtcars$cyl,
                       levels=c(4,6,8),
                       labels=c("4","6","8"))

mtcars$am.f <- factor(mtcars$am,
                      levels=c(0,1),
                      labels=c("auto", "standard"))

boxplot(mpg ~ am.f *cyl.f,
        data=mtcars,
        varwidth=TRUE,
        col=c("gold","darkgreen"),
        main="MPG Distribution by Auto Type",
        xlab="Auto Type")
```

创建汽缸数量的因子

创建变速箱类型的因子

生成箱线图

图形如图6-14所示。

图6-14再一次清晰地显示出油耗随着缸数的下降而减少。对于四缸和六缸车型，标准变速箱（standard）的油耗更高。但是对于八缸车型，油耗似乎没有差别。你也可以从箱线图的宽度看出，四缸标准变速箱的车型和八缸自动变速箱的车型在数据集中最常见。

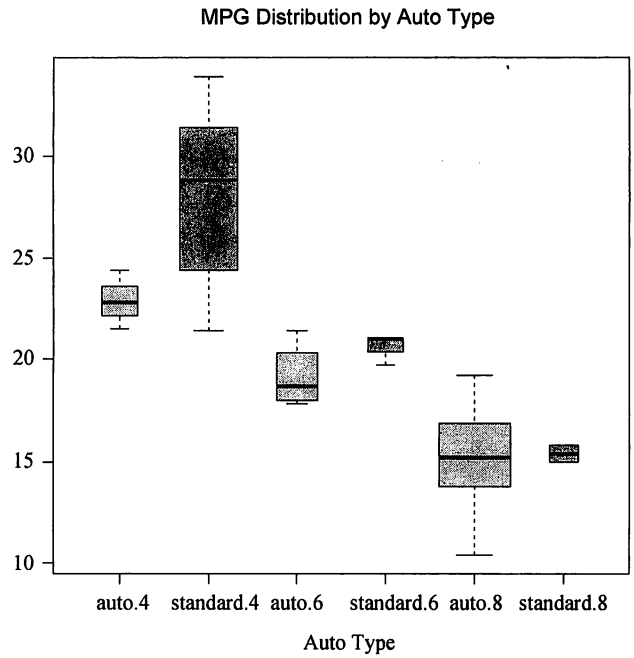


图6-14　不同变速箱类型和汽缸数量车型的箱线图（另见彩插图6-14）

6.5.2　小提琴图

在结束箱线图的讨论之前，有必要研究一种称为小提琴图（violin plot）的箱线图变种。小提琴图是箱线图与核密度图的结合。你可以使用vioplot包中的vioplot()函数绘制它。请在第一次使用之前先安装vioplot包。

vioplot()函数的使用格式为：

```
Vioplot(x1,x2,…,names=,col=)
```

其中*x1*，*x2*，…表示要绘制的一个或多个数值向量（将为每个向量绘制一幅小提琴图）。参数names是小提琴图中标签的字符向量，而col是一个为每幅小提琴图指定颜色的向量。

代码清单6-10中给出了一个示例。

代码清单6-10　小提琴图

```
library(vioplot)
x1 <- mtcars$mpg[mtcars$cyl==4]
x2 <- mtcars$mpg[mtcars$cyl==6]
x3 <- mtcars$mpg[mtcars$cyl==8]
vioplot(x1, x2, x3,
        names=c("4 cyl", "6 cyl", "8 cyl"),
        col="gold")
title("Violin Plots of Miles Per Gallon")
```

注意 vioplot()函数要求你将要绘制的不同组分离到不同的变量中。结果如图6-15所示。

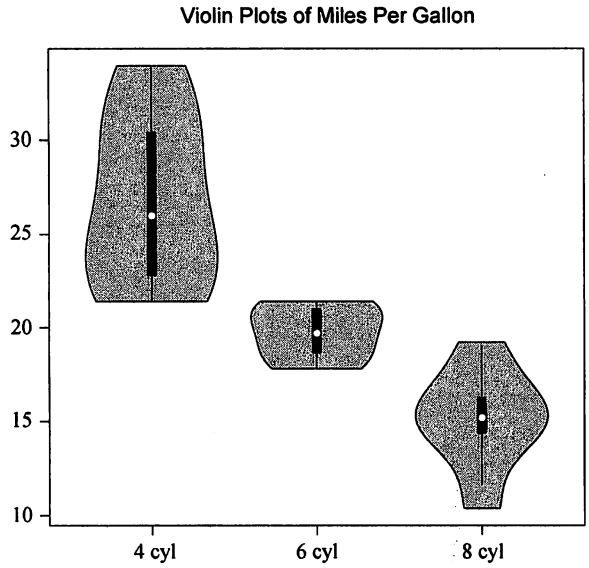


图6-15 汽缸数量和每加仑汽油行驶英里数的小提琴图

小提琴图基本上是核密度图以镜像方式在箱线图上的叠加。在图中，白点是中位数，黑色盒型的范围是下四分位点到上四分位点，细黑线表示须。外部形状即为核密度估计。小提琴图还没有真正地流行起来。同样，这可能也是由于普遍缺乏方便好用的软件导致的。时间会证明一切。

我们将以点图结束本章。与之前看到的图形不同，点图绘制变量中的所有值。

6.6 点图

点图提供了一种在简单水平刻度上绘制大量有标签值的方法。你可以使用dotchart()函数创建点图，格式为：

```
dotchart(x,labels=)
```

其中的x是一个数值向量，而labels则是由每个点的标签组成的向量。你可以通过添加参数groups来选定一个因子，用以指定x中元素的分组方式。如果这样做，则参数gcolor可以控制不同组标签的颜色，cex可控制标签的大小。这里是mtcars数据集的一个示例：

```
dotchart(mtcars$mpg, labels=row.names(mtcars), cex=.7,
         main="Gas Mileage for Car Models",
         xlab="Miles Per Gallon")
```

绘图结果已在图6-16中给出。

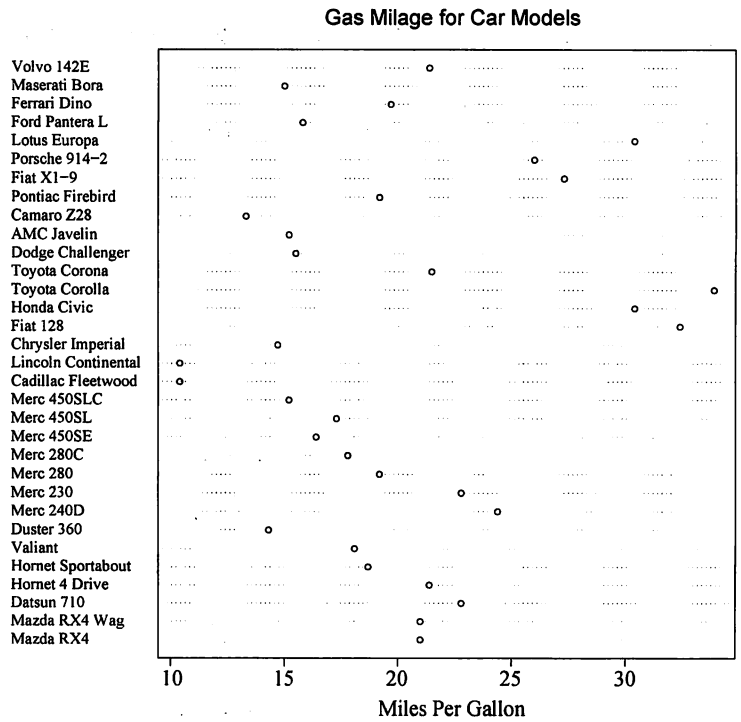


图6-16　每种车型每加仑汽油行驶英里数的点图

图6-16可以让你在同一个水平轴上观察每种车型的每加仑汽油行驶英里数。通常来说，点图在经过排序并且分组变量被不同的符号和颜色区分开的时候最有用。代码清单6-11给出了一个示例。

代码清单6-11　分组、排序、着色后的点图

```
x <- mtcars[order(mtcars$mpg),]
x$cyl <- factor(x$cyl)
x$color[x$cyl==4] <- "red"
x$color[x$cyl==6] <- "blue"
x$color[x$cyl==8] <- "darkgreen"
dotchart(x$mpg,
         labels = row.names(x),
         cex=.7,
         groups = x$cyl,
         gcolor = "black",
         color = x$color,
         pch=19,
         main = "Gas Mileage for Car Models\ngrouped by cylinder",
         xlab = "Miles Per Gallon")
```

在本例中，根据每加仑汽油行驶英里数（从最低到最高）对数据框mtcars进行排序，结果保存为数据框x。数值向量cyl被转换为一个因子。一个字符型向量（color）被添加到了数据框x中，根据cyl的值，它所含的值为"red"、"blue"或"darkgreen"。另外，各数据点的标签取

自数据框的行名（车辆型号）。数据点根据汽缸数量分组。数字4、6和8以黑色显示。点和标签的颜色来自向量color，点以填充的圆圈表示。代码清单6-11绘图的结果如图6-17所示。

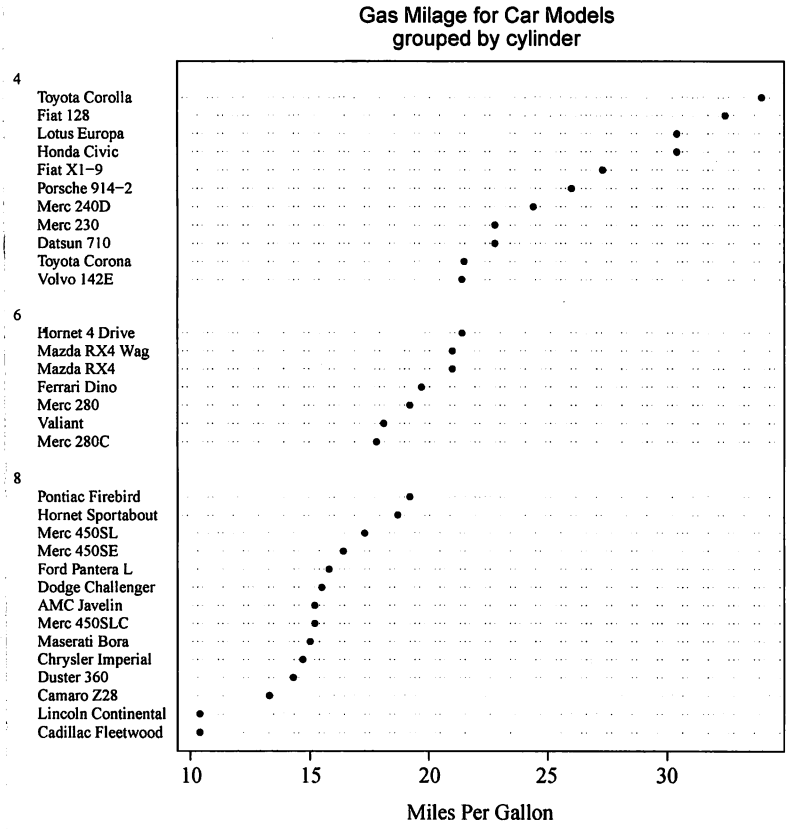


图6-17 各车型依汽缸数量分组的每加仑汽油行驶英里数点图

在图6-17中，许多特征第一次明显起来。你再次看到，随着汽缸数的减少，每加仑汽油行驶的英里数有了增加。但你同时也看到了例外。例如，Pontiac Firebird有8个汽缸，但较六缸的Mercury 280C和Valiant的行驶英里数更多。六缸的Hornet 4 Drive与四缸的Volvo 142E的每加仑汽油行驶英里数相同。同样明显的是，Toyota Corolla的油耗最低，而Lincoln Continental和Cadillac Fleetwood是英里数较低一端的离群点。

在本例中，你可以从点图中获得显著的洞察力，因为每个点都有标签，每个点的值都有其内在含义，并且这些点是以一种能够促进比较的方式排布的。但是随着数据点的增多，点图的实用性随之下降。

注意 点图有许多变种。Jacoby（2006）对点图进行了非常有意义的讨论，并且提供了创新型应用的R代码。此外，Hmisc包也提供了一个带有许多附加功能的点图函数（恰如其分地叫做dotchart2）。

6.7　小结

本章我们学习了描述连续型和类别型变量的方法。我们看到了如何用条形图和饼图（在较小程度上）了解类别型变量的分布， 以及如何通过堆砌条形图和分组条形图理解不同类别型输出的组间差异。我们同时探索了直方图、核密度图、箱线图、轴须图以及点图可视化连续型变量分布的方式。最后，我们探索了使用叠加的核密度图、并列箱线图和分组点图可视化连续型输出变量组间差异的方法。

在后续各章，我们会将对单变量的关注拓展到双变量和多变量图形中。你将看到同时用图形刻画许多变量间关系的方法，使用的方法包括散点图、多组折线图、马赛克图、相关图、lattice 图形，等等。

下一章，我们将关注用于描述分布和二元关系的定量统计方法以及一类推断方法，这类推断方法可用于评估变量间的关系是真实存在的，还是由于抽样误差导致的。

第7章 基本统计分析

7

本章内容

- 描述性统计分析
- 频数表和列联表
- 相关系数和协方差
- t检验
- 非参数统计

在前几章中，你学习了如何将数据导入到R中，以及如何使用一系列函数组织数据并将其转换成为可用的格式。然后，我们评述了数据可视化的基本方法。

在数据被组织成合适的形式后，你也开始使用图形探索数据，而下一步通常就是使用数值描述每个变量的分布，接下来则是两两探索所选择变量之间的关系。其目的是回答如下问题。

- 各车型的油耗如何？特别是，在对车型的调查中，每加仑汽油行驶英里数的分布是什么样的？（均值、标准差、中位数、值域等。）
- 在进行新药实验后，用药组和安慰剂组的治疗结果（无改善、一定程度的改善、显著的改善）相比如何？实验参与者的性别是否对结果有影响？
- 收入和预期寿命的相关性如何？它是否明显不为零？
- 美国的某些地区是否更有可能因为你犯罪而将你监禁？不同地区的差别是否在统计上显著？

本章，我们将评述用于生成基本的描述性统计量和推断统计量的R函数。首先，我们将着眼于定量变量的位置和尺度的衡量方式。然后我们将学习生成类别型变量的频数表和列联表的方法（以及连带的卡方检验）。接下来，我们将考察连续型和有序型变量相关系数的多种形式。最后，我们将转而通过参数检验（t检验）和非参数检验（Mann-Whitney U检验、Kruskal-Wallis检验）方法研究组间差异。虽然我们关注的是数值结果，但也将通篇提及用于可视化这些结果的图形方法。

本章中涵盖的统计方法通常会在本科第一年的统计课程中讲授。如果你对这些方法不熟悉，有两份优秀的文献可供参考：McCall（2000）和Snedecor & Cochran（1989）。除此之外，对于讲到的每个主题，也有许多翔实的在线资源可供参考（如维基百科）。

7.1　描述性统计分析

本节中，我们将关注分析连续型变量的中心趋势、变化性和分布形状的方法。为了便于说明，我们将使用第1章中*Motor Trend* 杂志的车辆路试（mtcars）数据集。我们的关注焦点是每加仑汽油行驶英里数（mpg）、马力（hp）和车重（wt）。

```
> vars <- c("mpg", "hp", "wt")
> head(mtcars[vars])
                   mpg  hp   wt
Mazda RX4         21.0 110 2.62
Mazda RX4 Wag     21.0 110 2.88
Datsun 710        22.8  93 2.32
Hornet 4 Drive    21.4 110 3.21
Hornet Sportabout 18.7 175 3.44
Valiant           18.1 105 3.46
```

我们将首先查看所有32种车型的描述性统计量，然后按照变速箱类型（am）和汽缸数（cyl）考察描述性统计量。变速箱类型是一个以0表示自动挡、1表示手动挡来编码的二分变量，而汽缸数可为4、5或6。

7.1.1　方法云集

在描述性统计量的计算方面，R中的选择多得让人尴尬。让我们从基础安装中包含的函数开始，然后查看那些用户贡献包中的扩展函数。

对于基础安装，你可以使用summary()函数来获取描述性统计量。代码清单7-1展示了一个示例。

代码清单7-1　通过summary()计算描述性统计量

```
> summary(mtcars[vars])
      mpg             hp              wt
 Min.   :10.4   Min.   : 52.0   Min.   :1.51
 1st Qu.:15.4   1st Qu.: 96.5   1st Qu.:2.58
 Median :19.2   Median :123.0   Median :3.33
 Mean   :20.1   Mean   :146.7   Mean   :3.22
 3rd Qu.:22.8   3rd Qu.:180.0   3rd Qu.:3.61
 Max.   :33.9   Max.   :335.0   Max.   :5.42
```

summary()函数提供了最小值、最大值、四分位数和数值型变量的均值，以及因子向量和逻辑型向量的频数统计。你可以使用第5章中的apply()函数或sapply()函数计算所选择的任意描述性统计量。对于sapply()函数，其使用格式为：

```
sapply(x, FUN, options)
```

其中的*x*是你的数据框（或矩阵），*FUN*为一个任意的函数。如果指定了*options*，它们将被传递给*FUN*。你可以在这里插入的典型函数有mean、sd、var、min、max、median、length、range和quantile。函数fivenum()可返回图基五数总括（Tukey's five-number summary，即最小值、下四分位数、中位数、上四分位数和最大值）。

令人惊讶的是，基础安装并没有提供偏度和峰度的计算函数，不过你可以自行添加。代码清单7-2中的示例计算了若干描述性统计量，其中包括偏度和峰度。

代码清单7-2 通过sapply()计算描述性统计量

```
> mystats <- function(x, na.omit=FALSE){
                if (na.omit)
                    x <- x[!is.na(x)]
                m <- mean(x)
                n <- length(x)
                s <- sd(x)
                skew <- sum((x-m)^3/s^3)/n
                kurt <- sum((x-m)^4/s^4)/n - 3
                return(c(n=n, mean=m, stdev=s, skew=skew, kurtosis=kurt))
              }
> sapply(mtcars[vars], mystats)
           mpg      hp      wt
n       32.000  32.000 32.0000
mean    20.091 146.688  3.2172
stdev    6.027  68.563  0.9785
skew     0.611   0.726  0.4231
kurtosis -0.373  -0.136 -0.0227
```

对于样本中的车型，每加仑汽油行驶英里数的平均值为20.1，标准差为6.0。分布呈现右偏（偏度+0.61），并且较正态分布稍平（峰度–0.37）。如果你对数据绘图，这些特征最显而易见。请注意，如果你只希望单纯地忽略缺失值，那么应当使用sapply(mtcars[vars], mystats, na.omit=TRUE)。

扩展

若干用户贡献包都提供了计算描述性统计量的函数，其中包括Hmisc、pastecs和psych。由于这些包并未包括在基础安装中，所以需要在首次使用之前先进行安装（参考1.4节）。

Hmisc包中的describe()函数可返回变量和观测的数量、缺失值和唯一值的数目、平均值、分位数，以及五个最大的值和五个最小的值。代码清单7-3提供了一个示例。

代码清单7-3 通过Hmisc包中的describe()函数计算描述性统计量

```
> library(Hmisc)
> describe(mtcars[vars])

 3  Variables      32  Observations
---------------------------------------------------------------------------
mpg
n missing  unique  Mean    .05    .10    .25    .50    .75    .90    .95
32       0    25   20.09 12.00  14.34  15.43  19.20  22.80  30.09  31.30

lowest : 10.4 13.3 14.3 14.7 15.0, highest: 26.0 27.3 30.4 32.4 33.9
---------------------------------------------------------------------------
hp
n missing  unique    Mean    .05     .10    .2     .50    .75    .90     .95
32       0     22   146.7  63.65   66.00 96.50 123.00 180.00 243.50 253.55
```

```
lowest :  52  62  65  66  91, highest: 215 230 245 264 335
--------------------------------------------------------------------------
wt
n missing  unique    Mean    .05    .10    .25    .50    .75    .90    .95
32       0      29   3.217  1.736  1.956  2.581  3.325  3.610  4.048  5.293

lowest : 1.513 1.615 1.835 1.935 2.140, highest: 3.845 4.070 5.250 5.345
5.424
--------------------------------------------------------------------------
```

pastecs包中有一个名为stat.desc()的函数，它可以计算种类繁多的描述性统计量。使用格式为：

```
stat.desc(x, basic=TRUE, desc=TRUE, norm=FALSE, p=0.95)
```

其中的*x*是一个数据框或时间序列。若basic=TRUE（默认值），则计算其中所有值、空值、缺失值的数量，以及最小值、最大值、值域，还有总和。若desc=TRUE（同样也是默认值），则计算中位数、平均数、平均数的标准误、平均数置信度为95%的置信区间、方差、标准差以及变异系数。最后，若norm=TRUE（不是默认的），则返回正态分布统计量，包括偏度和峰度（以及它们的统计显著程度）和Shapiro－Wilk正态检验结果。这里使用了p值来计算平均数的置信区间（默认置信度为0.95）。代码清单7-4给出了一个示例。

代码清单7-4　通过pastecs包中的stat.desc()函数计算描述性统计量

```
> library(pastecs)
> stat.desc(mtcars[vars])
                 mpg       hp      wt
nbr.val        32.00   32.000  32.000
nbr.null        0.00    0.000   0.000
nbr.na          0.00    0.000   0.000
min            10.40   52.000   1.513
max            33.90  335.000   5.424
range          23.50  283.000   3.911
sum           642.90 4694.000 102.952
median         19.20  123.000   3.325
mean           20.09  146.688   3.217
SE.mean         1.07   12.120   0.173
CI.mean.0.95    2.17   24.720   0.353
var            36.32 4700.867   0.957
std.dev         6.03   68.563   0.978
coef.var        0.30    0.467   0.304
```

似乎这还不够，psych包也拥有一个名为describe()的函数，它可以计算非缺失值的数量、平均数、标准差、中位数、截尾均值、绝对中位差、最小值、最大值、值域、偏度、峰度和平均值的标准误。代码清单7-5中有一个示例。

代码清单7-5　通过psych包中的describe()计算描述性统计量

```
> library(psych)

Attaching package: 'psych'
```

```
The following object(s) are masked from package:Hmisc :
 describe

> describe(mtcars[vars])
    var  n   mean    sd median trimmed   mad   min    max
mpg   1 32  20.09  6.03  19.20   19.70  5.41 10.40  33.90
hp    2 32 146.69 68.56 123.00  141.19 77.10 52.00 335.00
wt    3 32   3.22  0.98   3.33    3.15  0.77  1.51   5.42
     range skew kurtosis    se
mpg  23.50 0.61    -0.37  1.07
hp  283.00 0.73    -0.14 12.12
wt    3.91 0.42    -0.02  0.17
```

一语中的，选择多得简直让人尴尬！

注意 在前面的示例中，psych包和Hmisc包均提供了名为describe()的函数。R如何知道该使用哪个呢？简言之，如代码清单7-5所示，最后载入的程序包优先。在这里，psych在Hmisc之后被载入，然后显示了一条信息，提示Hmisc包中的describe()函数被psych包中的同名函数所屏蔽（masked）。键入describe()后，R在搜索这个函数时将首先找到psych包中的函数并执行它。如果你想改而使用Hmisc包中的版本，可以键入Hmisc::describe(mt)。这个函数仍然在那里。你只是需要给予R更多信息以找到它。

你已经了解了如何为整体的数据计算描述性统计量，现在让我们看看如何获取数据中各组的统计量。

7.1.2 分组计算描述性统计量

在比较多组个体或观测时，关注的焦点经常是各组的描述性统计信息，而不是样本整体的描述性统计信息。同样地，在R中完成这个任务有若干种方法。我们将以获取变速箱类型各水平的描述性统计量开始。

在第5章中，我们讨论了整合数据的方法。你可以使用aggregate()函数（5.6.2节）来分组获取描述性统计量，如代码清单7-6所示。

代码清单7-6 使用aggregate()分组获取描述性统计量

```
> aggregate(mtcars[vars], by=list(am=mtcars$am), mean)
  am  mpg  hp   wt
1  0 17.1 160 3.77
2  1 24.4 127 2.41
> aggregate(mtcars[vars], by=list(am=mtcars$am), sd)
  am  mpg   hp    wt
1  0 3.83 53.9 0.777
2  1 6.17 84.1 0.617
```

注意list(am=mtcars$am)的使用。如果使用的是list(mtcars$am)，则am列将被标注为Group.1而不是am。你使用这个赋值指定了一个更有帮助的列标签。如果有多个分组变量，可以

使用by=list(*name1=groupvar1, name2=groupvar2, ... , groupvarN*)这样的语句。

遗憾的是，aggregate()仅允许在每次调用中使用平均数、标准差这样的单返回值函数。它无法一次返回若干个统计量。要完成这项任务，可以使用by()函数。格式为：

```
by(data, INDICES, FUN)
```

其中*data*是一个数据框或矩阵，*INDICES*是一个因子或因子组成的列表，定义了分组，*FUN*是任意函数。代码清单7-7提供了一个示例。

代码清单7-7　使用by()分组计算描述性统计量

```
> dstats <- function(x)(c(mean=mean(x), sd=sd(x)))
> by(mtcars[vars], mtcars$am, dstats)

mtcars$am: 0
mean.mpg  mean.hp  mean.wt   sd.mpg    sd.hp    sd.wt
  17.147  160.263    3.769    3.834   53.908    0.777
------------------------------------------------
mtcars$am: 1
mean.mpg  mean.hp  mean.wt   sd.mpg    sd.hp    sd.wt
  24.392  126.846    2.411    6.167   84.062    0.617
```

扩展

doBy包和psych包也提供了分组计算描述性统计量的函数。同样地，它们未随基本安装发布，必须在首次使用前进行安装。doBy包中summaryBy()函数的使用格式为：

```
summaryBy(formula, data=dataframe, FUN=function)
```

其中的*formula*接受以下的格式：

```
var1 + var2 + var3 + … + varN ~ groupvar1 + groupvar2 + … + groupvarN
```

在~左侧的变量是需要分析的数值型变量，而右侧的变量是类别型的分组变量。*function*可为任何内建或用户自编的R函数。使用7.2.1节中创建的mystats()函数的一个示例如代码清单7-8所示。

代码清单7-8　使用doBy包中的summaryBy()分组计算概述统计量

```
> library(doBy)
> summaryBy(mpg+hp+wt~am, data=mtcars, FUN=mystats)
  am mpg.n mpg.mean mpg.stdev mpg.skew mpg.kurtosis hp.n hp.mean hp.stdev
1  0    19     17.1      3.83   0.0140       -0.803   19     160     53.9
2  1    13     24.4      6.17   0.0526       -1.455   13     127     84.1
  hp.skew hp.kurtosis wt.n wt.mean wt.stdev wt.skew wt.kurtosis
1 -0.0142      -1.210   19    3.77    0.777   0.976       0.142
2  1.3599       0.563   13    2.41    0.617   0.210      -1.174
```

psych包中的describe.by()函数可计算和describe相同的描述性统计量，只是按照一个或多个分组变量分层，如代码清单7-9所示。

代码清单7-9 使用psych包中的describe.by()分组计算概述统计量

```
> library(psych)
> describe.by(mtcars[vars], mtcars$am)
group: 0
    var  n   mean    sd median trimmed   mad   min    max
mpg   1 19  17.15  3.83  17.30   17.12  3.11 10.40  24.40
hp    2 19 160.26 53.91 175.00  161.06 77.10 62.00 245.00
wt    3 19   3.77  0.78   3.52    3.75  0.45  2.46   5.42
     range  skew kurtosis    se
mpg  14.00  0.01    -0.80  0.88
hp  183.00 -0.01    -1.21 12.37
wt    2.96  0.98     0.14  0.18
------------------------------------------------

group: 1
    var  n   mean    sd median trimmed   mad   min    max
mpg   1 13  24.39  6.17  22.80   24.38  6.67 15.00  33.90
hp    2 13 126.85 84.06 109.00  114.73 63.75 52.00 335.00
wt    3 13   2.41  0.62   2.32    2.39  0.68  1.51   3.57
     range skew kurtosis    se
mpg  18.90 0.05    -1.46  1.71
hp  283.00 1.36     0.56 23.31
wt    2.06 0.21    -1.17  0.17
```

与前面的示例不同，describe.by()函数不允许指定任意函数，所以它的普适性较低。若存在一个以上的分组变量，你可以使用list(*groupvar1*, *groupvar2*, ... , *groupvarN*)来表示它们。但这仅在分组变量交叉后不出现空白单元时有效。

最后，可以使用5.6.3节中描述的reshape包灵活地按组导出描述性统计量。（如果你尚未阅读那一节，建议在继续往下读之前先看看它。）首先，使用：

```
dfm <- melt(dataframe, measure.vars=y, id.vars=g)
```

融合数据框。其中的*dataframe*包含着数据，*y*是一个向量，指明了要进行概述的数值型变量（默认使用所有变量），而*g*是由一个或多个分组变量组成的向量。然后使用：

```
cast(dfm, groupvar1 + groupvar2 + … + variable ~ ., FUN)
```

重铸数据。分组变量以+号分隔，这里的variable只取其字面含义[1]，而*FUN*是一个任意函数。

在本节的最后一个例子中，我们将运用数据重塑的方法来取得由变速箱类型与汽缸数形成的每个亚组的描述性统计量。我们要获取的描述性统计量是样本大小、平均数和标准差。代码和结果如代码清单7-10所示。

代码清单7-10 通过reshape包分组计算概述统计量

```
> library(reshape)
> dstats <- function(x)(c(n=length(x), mean=mean(x), sd=sd(x)))
> dfm <- melt(mtcars, measure.vars=c("mpg", "hp", "wt"),
```

① 即仅表示重铸后数据框中的变量variable。——译者注

```
                id.vars=c("am", "cyl"))
> cast(dfm, am + cyl + variable ~ ., dstats)

   am cyl variable  n   mean     sd
1   0   4      mpg  3  22.90  1.453
2   0   4       hp  3  84.67 19.655
3   0   4       wt  3   2.94  0.408
4   0   6      mpg  4  19.12  1.632
5   0   6       hp  4 115.25  9.179
6   0   6       wt  4   3.39  0.116
7   0   8      mpg 12  15.05  2.774
8   0   8       hp 12 194.17 33.360
9   0   8       wt 12   4.10  0.768
10  1   4      mpg  8  28.07  4.484
11  1   4       hp  8  81.88 22.655
12  1   4       wt  8   2.04  0.409
13  1   6      mpg  3  20.57  0.751
14  1   6       hp  3 131.67 37.528
15  1   6       wt  3   2.75  0.128
16  1   8      mpg  2  15.40  0.566
17  1   8       hp  2 299.50 50.205
18  1   8       wt  2   3.37  0.283
```

我个人认为这种方式最为简洁动人。数据分析人员对于展示哪些描述性统计量以及结果采用什么格式都有着自己的偏好，这也许就是有如此多不同方法的原因。你可以选择最适合的方式，或是创造属于自己的方法！

7.1.3　结果的可视化

分布特征的数值刻画的确很重要，但是这并不能代替视觉呈现。对于定量变量，我们有直方图（6.3节）、密度图（6.4节）、箱线图（6.5节）和点图（6.6节）。它们都可以让我们洞悉那些依赖于观察一小部分描述性统计量时忽略的细节。

目前我们考虑的函数都是为定量变量提供概述的。下一节中的函数则允许考察类别型变量的分布。

7.2　频数表和列联表

在本节中，我们将着眼于类别型变量的频数表和列联表，以及相应的独立性检验、相关性的度量、图形化展示结果的方法。我们除了使用基础安装中的函数，还将连带使用vcd包和gmodels包中的函数。下面的示例中，假设A、B和C代表类别型变量。

本节中的数据来自vcd包中的Arthritis数据集。这份数据来自Kock & Edward（1988），表示了一项风湿性关节炎新疗法的双盲临床实验的结果。前几个观测是这样的：

```
> library(vcd)
> head(Arthritis)
  ID Treatment  Sex Age Improved
```

```
1 57   Treated Male  27     Some
2 46   Treated Male  29     None
3 77   Treated Male  30     None
4 17   Treated Male  32   Marked
5 36   Treated Male  46   Marked
6 23   Treated Male  58   Marked
```

治疗情况（安慰剂治疗、用药治疗）、性别（男性、女性）和改善情况（无改善、一定程度的改善、显著改善）均为类别型因子[①]。下一节中，我们将使用此数据创建频数表和列联表（交叉的分类）。

7.2.1 生成频数表

R中提供了用于创建频数表和列联表的若干种方法。其中最重要的函数已列于表7-1中。

表7-1 用于创建和处理列联表的函数

函 数	描 述
table(*var1, var2,..., varN*)	使用N个类别型变量（因子）创建一个N维列联表
Xtabs(*formula, data*)	根据一个公式和一个矩阵或数据框创建一个N维列联表
prop.table(*table, margins*)	依*margins*定义的边际列表将表中条目表示为分数形式
Margin.table(*table, margins*)	依*margins*定义的边际列表计算表中条目的和
Addmargins(*table, margins*)	将概述边*margins*（默认是求和结果）放入表中
ftable(*table*)	创建一个紧凑的“平铺”式列联表

接下来，我们将逐个使用以上函数来探索类别型变量。我们首先考察简单的频率表，接下来是二维列联表，最后是多维列联表。第一步是使用table()或xtabs()函数创建一个表，然后使用其他函数处理它。

1. 一维列联表

可以使用table()函数生成简单的频数统计表。示例如下：

```
> mytable <- with(Arthritis, table(Improved))
> mytable
Improved
  None   Some Marked
    42     14     28
```

可以用prop.table()将这些频数转化为比例值：

```
> prop.table(mytable)
Improved
  None   Some Marked
 0.500  0.167  0.333
```

或使用prop.table()*100转化为百分比：

① 分别对应数据中的变量*Treatment*（*Placebo*、*Treated*）、*Sex*（*Male*、*Female*）和*Improved*（*None*、*Some*、*Marked*）。

——译者注

```
> prop.table(mytable)*100
Improved
  None   Some Marked
  50.0   16.7   33.3
```

这里可以看到，有50%的研究参与者获得了一定程度或者显著的改善（16.7 + 33.3）。

2. 二维列联表

对于二维列联表，table()函数的使用格式为：

```
mytable <- table(A, B)
```

其中的*A*是行变量，*B*是列变量。除此之外，xtabs()函数还可使用公式风格的输入创建列联表，格式为：

```
mytable <- xtabs(~ A + B, data=mydata)
```

其中的*mydata*是一个矩阵或数据框。总的来说，要进行交叉分类的变量应出现在公式的右侧（即~符号的右方），以+作为分隔符。若某个变量写在公式的左侧，则其为一个频数向量（在数据已经被表格化时很有用）。

对于Arthritis数据，有：

```
> mytable <- xtabs(~ Treatment+Improved, data=Arthritis)
> mytable
         Improved
Treatment None Some Marked
  Placebo   29    7      7
  Treated   13    7     21
```

你可以使用margin.table()和prop.table()函数分别生成边际频数和比例。行和与行比例可以这样计算：

```
> margin.table(mytable, 1)
Treatment
Placebo Treated
     43      41
> prop.table(mytable, 1)
         Improved
Treatment  None  Some Marked
  Placebo 0.674 0.163  0.163
  Treated 0.317 0.171  0.512
```

下标1指代table()语句中的第一个变量。观察表格可以发现，与接受安慰剂的个体中有显著改善的16%相比，接受治疗的个体中的51%的个体病情有了显著的改善。

列和与列比例可以这样计算：

```
> margin.table(mytable, 2)
Improved
  None   Some Marked
    42     14     28
> prop.table(mytable, 2)
         Improved
Treatment  None  Some Marked
Placebo 0.690 0.500  0.250
Treated 0.310 0.500  0.750
```

这里的下标2指代table()语句中的第二个变量。

各单元格所占比例可用如下语句获取：

```
> prop.table(mytable)
         Improved
Treatment   None   Some Marked
  Placebo 0.3452 0.0833 0.0833
  Treated 0.1548 0.0833 0.2500
```

你可以使用addmargins()函数为这些表格添加边际和。例如，以下代码添加了各行的和与各列的和：

```
> addmargins(mytable)
         Improved
Treatment None Some Marked Sum
  Placebo   29    7      7  43
  Treated   13    7     21  41
  Sum       42   14     28  84
> addmargins(prop.table(mytable))
         Improved
Treatment   None   Some Marked    Sum
  Placebo 0.3452 0.0833 0.0833 0.5119
  Treated 0.1548 0.0833 0.2500 0.4881
  Sum     0.5000 0.1667 0.3333 1.0000
```

在使用addmargins()时，默认行为是为表中所有的变量创建边际和。作为对照：

```
> addmargins(prop.table(mytable, 1), 2)
         Improved
Treatment  None  Some Marked   Sum
  Placebo 0.674 0.163  0.163 1.000
  Treated 0.317 0.171  0.512 1.000
```

仅添加了各行的和。类似地，

```
> addmargins(prop.table(mytable, 2), 1)
         Improved
Treatment  None  Some Marked
  Placebo 0.690 0.500  0.250
  Treated 0.310 0.500  0.750
  Sum     1.000 1.000  1.000
```

添加了各列的和。在表中可以看到，有显著改善患者中的25%是接受安慰剂治疗的。

注意 table()函数默认忽略缺失值（NA）。要在频数统计中将NA视为一个有效的类别，请设定参数useNA="ifany"。

使用gmodels包中的CrossTable()函数是创建二维列联表的第三种方法。CrossTable()函数仿照SAS中PROC FREQ或SPSS中CROSSTABS的形式生成二维列联表。示例参阅代码清单7-11。

代码清单7-11　使用CrossTable生成二维列联表

```
> library(gmodels)
> CrossTable(Arthritis$Treatment, Arthritis$Improved)

   Cell Contents
|-------------------------|
|                       N |
| Chi-square contribution |
|           N / Row Total |
|           N / Col Total |
|         N / Table Total |
|-------------------------|

Total Observations in Table:  84


                    | Arthritis$Improved
Arthritis$Treatment |      None |      Some |    Marked | Row Total |
--------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
            Placebo |        29 |         7 |         7 |        43 |
                    |     2.616 |     0.004 |     3.752 |           |
                    |     0.674 |     0.163 |     0.163 |     0.512 |
                    |     0.690 |     0.500 |     0.250 |           |
                    |     0.345 |     0.083 |     0.083 |           |
--------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
            Treated |        13 |         7 |        21 |        41 |
                    |     2.744 |     0.004 |     3.935 |           |
                    |     0.317 |     0.171 |     0.512 |     0.488 |
                    |     0.310 |     0.500 |     0.750 |           |
                    |     0.155 |     0.083 |     0.250 |           |
--------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
       Column Total |        42 |        14 |        28 |        84 |
                    |     0.500 |     0.167 |     0.333 |           |
--------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|
```

CrossTable()函数有很多选项，可以做许多事情：计算（行、列、单元格）的百分比；指定小数位数；进行卡方、Fisher和McNemar独立性检验；计算期望和（皮尔逊、标准化、调整的标准化）残差；将缺失值作为一种有效值；进行行和列标题的标注；生成SAS或SPSS风格的输出。参阅help(CrossTable)以了解详情。

如果有两个以上的类别型变量，那么你就是在处理多维列联表。我们将在下面考虑这种情况。

3. 多维列联表

table()和xtabs()都可以基于三个或更多的类别型变量生成多维列联表。margin.table()、prop.table()和addmargins()函数可以自然地推广到高于二维的情况。另外，ftable()函数可以以一种紧凑而吸引人的方式输出多维列联表。代码清单7-12中给出了一个示例。

代码清单7-12 三维列联表

```
> mytable <- xtabs(~ Treatment+Sex+Improved, data=Arthritis)
> mytable
, , Improved = None

         Sex
Treatment Female Male
  Placebo     19   10
  Treated      6    7

, , Improved = Some

         Sex
Treatment Female Male
  Placebo      7    0
  Treated      5    2

, , Improved = Marked

         Sex
Treatment Female Male
  Placebo      6    1
  Treated     16    5

> ftable(mytable)
                    Sex Female Male
Treatment Improved
Placebo   None             19   10
          Some              7    0
          Marked            6    1
Treated   None              6    7
          Some              5    2
          Marked           16    5

> margin.table(mytable, 1)
Treatment
Placebo Treated
     43      41
> margin.table(mytable, 2)
Sex
Female   Male
    59     25
> margin.table(mytable, 3)
Improved
  None   Some Marked
    42     14     28
> margin.table(mytable, c(1, 3))
         Improved
Treatment None Some Marked
  Placebo   29    7      7
  Treated   13    7     21
> ftable(prop.table(mytable, c(1, 2)))
                  Improved  None  Some Marked
Treatment Sex
```

❶ 各单元格的频数

❷ 边际频数

❸ 治疗情况（Treatment）×改善情况（Improved）的边际频数

❹ 治疗情况（Treatment）×性别（Sex）的各类改善情况比例

7

```
Placebo   Female          0.594 0.219  0.188
          Male            0.909 0.000  0.091
Treated   Female          0.222 0.185  0.593
          Male            0.500 0.143  0.357

> ftable(addmargins(prop.table(mytable, c(1, 2)), 3))
                 Improved  None  Some Marked   Sum
Treatment Sex
Placebo   Female          0.594 0.219  0.188 1.000
          Male            0.909 0.000  0.091 1.000
Treated   Female          0.222 0.185  0.593 1.000
          Male            0.500 0.143  0.357 1.000
```

第❶部分代码生成了三维分组各单元格的频数。这段代码同时演示了如何使用ftable()函数输出更为紧凑和吸引人的表格。

第❷部分代码为治疗情况（Treatment）、性别（Sex）和改善情况（Improved）生成了边际频数。由于使用公式~Treatement+Sex+Improve创建了这个表，所以Treatment需要通过下标1来引用，Sex通过下标2来引用，Improve通过下标3来引用。

第❸部分代码为治疗情况（Treatment）× 改善情况（Improved）分组的边际频数，由不同性别（Sex）的单元加和而成。每个Treatment × Sex组合中改善情况为None、Some和Marked患者的比例由❹给出。在这里可以看到治疗组的男性中有36%有了显著改善，女性为59%。总而言之，比例将被添加到不在prop.table()调用中的下标上（本例中是第三个下标，或称Improve）。在最后一个例子中可以看到这一点，你在那里为第三个下标添加了边际和。

如果想得到百分比而不是比例，可以将结果表格乘以100。例如：

```
ftable(addmargins(prop.table(mytable, c(1, 2)), 3)) * 100
```

将生成下表：

```
                   Sex Female  Male   Sum
Treatment Improved
Placebo   None          65.5  34.5 100.0
          Some         100.0   0.0 100.0
          Marked        85.7  14.3 100.0
Treated   None          46.2  53.8 100.0
          Some          71.4  28.6 100.0
          Marked        76.2  23.8 100.0
```

列联表可以告诉你组成表格的各种变量组合的频数或比例，不过你可能还会对列联表中的变量是否相关或独立感兴趣。下一节我们会讲解独立性的检验。

7.2.2　独立性检验

R提供了多种检验类别型变量独立性的方法。本节中描述的三种检验分别为卡方独立性检验、Fisher精确检验和Cochran-Mantel－Haenszel检验。

1. 卡方独立性检验

你可以使用chisq.test()函数对二维表的行变量和列变量进行卡方独立性检验。示例参见代码清单7-13。

代码清单7-13 卡方独立性检验

```
> library(vcd)
> mytable <- xtabs(~Treatment+Improved, data=Arthritis)
> chisq.test(mytable)

        Pearson's Chi-squared test

data:  mytable
X-squared = 13.1, df = 2, p-value = 0.001463

> mytable <- xtabs(~Improved+Sex, data=Arthritis)
> chisq.test(mytable)

        Pearson's Chi-squared test

data:  mytable
X-squared = 4.84, df = 2, p-value = 0.0889

Warning message:
In chisq.test(mytable) : Chi-squared approximation may be incorrect
```

❶ 治疗情况和改善情况不独立

❷ 性别和改善情况独立

在结果❶中，患者接受的治疗和改善的水平看上去存在着某种关系（$p<0.01$）。而患者性别和改善情况之间却不存在关系（$p>0.05$）❷。这里的p值表示从总体中抽取的样本行变量与列变量是相互独立的概率。由于❶的概率值很小，所以你拒绝了治疗类型和治疗结果相互独立的原假设。由于❷的概率不够小，故没有足够的理由说明治疗结果和性别之间是不独立的。代码清单7-13中产生警告信息的原因是，表中的6个单元格之一（男性-一定程度上的改善）有一个小于5的值，这可能会使卡方近似无效。

2. Fisher精确检验

可以使用`fisher.test()`函数进行Fisher精确检验。Fisher精确检验的原假设是：边界固定的列联表中行和列是相互独立的。其调用格式为`fisher.test(mytable)`，其中的*mytable*是一个二维列联表。示例如下：

```
> mytable <- xtabs(~Treatment+Improved, data=Arthritis)
> fisher.test(mytable)
        Fisher's Exact Test for Count Data

data:  mytable
p-value = 0.001393
alternative hypothesis: two.sided
```

与许多统计软件不同的是，这里的`fisher.test()`函数可以在任意行列数大于等于2的二维列联表上使用，但不能用于2×2的列联表。

3. Cochran-Mantel-Haenszel检验

`mantelhaen.test()`函数可用来进行Cochran-Mantel-Haenszel卡方检验，其原假设是，两个名义变量在第三个变量的每一层中都是条件独立的。下列代码可以检验治疗情况和改善情况在性别的每一水平下是否独立。此检验假设不存在三阶交互作用（治疗情况×改善情况×性别）。

```
> mytable <- xtabs(~Treatment+Improved+Sex, data=Arthritis)
> mantelhaen.test(mytable)
```

```
        Cochran-Mantel-Haenszel test

data:  mytable
Cochran-Mantel-Haenszel M^2 = 14.6, df = 2, p-value = 0.0006647
```

结果表明，患者接受的治疗与得到的改善在性别的每一水平下并不独立（即，分性别来看，用药治疗的患者较接受安慰剂的患者有了更多的改善）。

7.2.3　相关性的度量

上一节中的显著性检验评估了是否存在充分的证据以拒绝变量间相互独立的原假设。如果可以拒绝原假设，那么你的兴趣就会自然而然地转向用以衡量相关性强弱的相关性度量。vcd包中的assocstats()函数可以用来计算二维列联表的phi系数、列联系数和Cramer's V系数。代码清单7-14给出了一个示例。

代码清单7-14　二维列联表的相关性度量

```
> library(vcd)
> mytable <- xtabs(~Treatment+Improved, data=Arthritis)
> assocstats(mytable)

                    X^2 df  P(> X^2)
Likelihood Ratio 13.530  2 0.0011536
Pearson          13.055  2 0.0014626

Phi-Coefficient   : 0.394
Contingency Coeff.: 0.367
Cramer's V        : 0.394
```

总体来说，较大的值意味着较强的相关性。vcd包也提供了一个kappa()函数，可以计算混淆矩阵的Cohen's kappa值以及加权的kappa值。（举例来说，混淆矩阵可以表示两位评判者对于一系列对象进行分类所得结果的一致程度。）

7.2.4　结果的可视化

R中拥有远远超出其他多数统计软件的、可视地探索类别型变量间关系的方法。通常，我们会使用条形图进行一维频数的可视化（参见6.1节）。vcd包中拥有优秀的、用于可视化多维数据集中类别型变量间关系的函数，可以绘制马赛克图和关联图（参见11.4节）。最后，ca包中的对应分析函数允许使用多种几何表示（Nenadic & Greenacre，2007）可视地探索列联表中行和列之间的关系。

7.2.5　将表转换为扁平格式

我们将以一个在其他R书籍中极少涵盖但又非常实用的话题结束本节。在你已经拥有一个列联表却需要原始的数据时怎么办？举例来说，假设有以下列联表：

```
                    Sex Female Male
Treatment Improved
Placebo   None             19   10
          Some              7    0
          Marked            6    1
Treated   None               6    7
          Some               5    2
          Marked            16    5
```

但需要的是这种格式：

```
  ID Treatment  Sex Age Improved
1 57   Treated Male  27     Some
2 46   Treated Male  29     None
3 77   Treated Male  30     None
4 17   Treated Male  32   Marked
5 36   Treated Male  46   Marked
6 23   Treated Male  58   Marked
[78 more rows go here]
```

R中的许多统计函数接受的是后一种格式而不是前一种格式。你可以使用代码清单7-15中提供的函数将R中的表转换回扁平的数据格式。

代码清单7-15 通过table2flat将表转换为扁平格式

```
table2flat <- function(mytable) {
  df <- as.data.frame(mytable)
  rows  <- dim(df)[1]
  cols  <- dim(df)[2]
  x <- NULL
  for (i in 1:rows){
    for (j in 1:df$Freq[i]){
      row <- df[i,c(1:(cols-1))]
      x <- rbind(x,row)
    }
  }
  row.names(x)<-c(1:dim(x)[1])
  return(x)

}
```

此函数可以接受一个R中的表格（行列数任意）并返回一个扁平格式的数据框。你也可以使用这个函数来输入已发表的研究中的表格。举例来说，假设你在某期刊上看到了表7-2，并想以扁平格式将其保存到R中。

表7-2 Arthritis数据集中治疗情况和改善情况的列联表

治疗情况	改善情况		
	无改善	一定程度的改善	显著改善
安慰剂治疗	29	7	7
用药治疗	13	17	21

代码清单7-16描述了一种可以解决这个问题的方法。

代码清单7-16　使用table2flat()函数转换已发表的数据

```
> treatment <- rep(c("Placebo", "Treated"), times=3)
> improved <- rep(c("None", "Some", "Marked"), each=2)
> Freq <- c(29,13,7,17,7,21)
> mytable <- as.data.frame(cbind(treatment, improved, Freq))
> mydata <- table2flat(mytable)
> head(mydata)
  treatment improved
1   Placebo     None
2   Placebo     None
3   Placebo     None
4   Treated     None
5   Placebo     Some
6   Placebo     Some
[12 more rows go here]
```

对列联表的讨论暂时到此为止，我们将在第11章和第15章中探讨更多高级话题。下面，我们将开始关注各种类型的相关系数。

7.3　相关

相关系数可以用来描述定量变量之间的关系。相关系数的符号（±）表明关系的方向（正相关或负相关），其值的大小表示关系的强弱程度（完全不相关时为0，完全相关时为1）。

本节中，我们将关注多种相关系数和相关性的显著性检验。我们将使用R基础安装中的state.x77数据集，它提供了美国50个州在1977年的人口、收入、文盲率、预期寿命、谋杀率和高中毕业率数据。数据集中还收录了气温和土地面积数据，但为了节约空间，这里将其丢弃。你可以使用help(state.x77)了解数据集的更多信息。除了基础安装以外，我们还将使用psych和ggm包。

7.3.1　相关的类型

R可以计算多种相关系数，包括Pearson相关系数、Spearman相关系数、Kendall相关系数、偏相关系数、多分格（polychoric）相关系数和多系列（polyserial）相关系数。下面让我们依次理解这些相关系数。

1. Pearson、Spearman和Kendall相关

Pearson积差相关系数衡量了两个定量变量之间的线性相关程度。Spearman等级相关系数则衡量分级定序变量之间的相关程度。Kendall's Tau相关系数也是一种非参数的等级相关度量。

cor()函数可以计算这三种相关系数，而cov()函数可用来计算协方差。两个函数的参数有很多，其中与相关系数的计算有关的参数可以简化为：

```
cor(x, use= , method= )
```

这些参数详述于表7-3中。

表7-3 cor和cov的参数

参 数	描 述
x	矩阵或数据框
use	指定缺失数据的处理方式。可选的方式为all.obs（假设不存在缺失数据——遇到缺失数据时将报错）、everything（遇到缺失数据时，相关系数的计算结果将被设为missing）、complete.obs（行删除）以及pairwise.complete.obs（成对删除，pairwise deletion）
method	指定相关系数的类型。可选类型为pearson、spearman或kendall

默认参数为use="everything"和method="pearson"。你可以在代码清单7-17中看到一个示例。

代码清单7-17 协方差和相关系数

```
> states<- state.x77[,1:6]
> cov(states)
           Population Income Illiteracy Life Exp  Murder  HS Grad
Population   19931684 571230    292.868 -407.842 5663.52 -3551.51
Income         571230 377573   -163.702  280.663 -521.89  3076.77
Illiteracy        293   -164      0.372   -0.482    1.58    -3.24
Life Exp         -408    281     -0.482    1.802   -3.87     6.31
Murder           5664   -522      1.582   -3.869   13.63   -14.55
HS Grad         -3552   3077     -3.235    6.313  -14.55    65.24

> cor(states)
           Population Income Illiteracy Life Exp Murder HS Grad
Population     1.0000  0.208      0.108   -0.068  0.344 -0.0985
Income         0.2082  1.000     -0.437    0.340 -0.230  0.6199
Illiteracy     0.1076 -0.437      1.000   -0.588  0.703 -0.6572
Life Exp      -0.0681  0.340     -0.588    1.000 -0.781  0.5822
Murder         0.3436 -0.230      0.703   -0.781  1.000 -0.4880
HS Grad       -0.0985  0.620     -0.657    0.582 -0.488  1.0000

> cor(states, method="spearman")
           Population Income Illiteracy Life Exp Murder HS Grad
Population      1.000  0.125      0.313   -0.104  0.346  -0.383
Income          0.125  1.000     -0.315    0.324 -0.217   0.510
Illiteracy      0.313 -0.315      1.000   -0.555  0.672  -0.655
Life Exp       -0.104  0.324     -0.555    1.000 -0.780   0.524
Murder          0.346 -0.217      0.672   -0.780  1.000  -0.437
HS Grad        -0.383  0.510     -0.655    0.524 -0.437   1.000
```

首个语句计算了方差和协方差，第二个语句则计算了Pearson积差相关系数，而第三个语句计算了Spearman等级相关系数。举例来说，我们可以看到收入和高中毕业率之间存在很强的正相关，而文盲率和预期寿命之间存在很强的负相关。

请注意，在默认情况下得到的结果是一个方阵（所有变量之间两两计算相关）。你同样可以计算非方形的相关矩阵。观察以下示例：

```
> x <- states[,c("Population", "Income", "Illiteracy", "HS Grad")]
> y <- states[,c("Life Exp", "Murder")]
> cor(x,y)
```

```
            Life Exp Murder
Population   -0.068  0.344
Income        0.340 -0.230
Illiteracy   -0.588  0.703
HS Grad       0.582 -0.488
```

当你对某一组变量与另外一组变量之间的关系感兴趣时，cor()函数的这种用法是非常实用的。注意，上述结果并未指明相关系数是否显著不为0（即，根据样本数据是否有足够的证据得出总体相关系数不为0的结论）。由于这个原因，你需要对相关系数进行显著性检验（在7.3.2节中阐述）。

2. 偏相关

偏相关是指在控制一个或多个定量变量时，另外两个定量变量之间的相互关系。你可以使用ggm包中的pcor()函数计算偏相关系数。ggm包没有被默认安装，在第一次使用之前需要先进行安装。函数调用格式为：

```
pcor(u, S)
```

其中的*u*是一个数值向量，前两个数值表示要计算相关系数的变量下标，其余的数值为条件变量（即要排除影响的变量）的下标。*S*为变量的协方差阵。这个示例有助于阐明用法：

```
> library(ggm)
> # 在控制了收入、文盲率和高中毕业率时
> # 人口和谋杀率的偏相关系数
> pcor(c(1,5,2,3,6), cov(states))
[1] 0.346
```

本例中，在控制了收入、文盲率和高中毕业率的影响时，人口和谋杀率之间的相关系数为0.346。偏相关系数常用于社会科学的研究中。

3. 其他类型的相关

polycor包中的hetcor()函数可以计算一种混合的相关矩阵，其中包括数值型变量的Pearson积差相关系数、数值型变量和有序变量之间的多系列相关系数、有序变量之间的多分格相关系数以及二分变量之间的四分相关系数。多系列、多分格和四分相关系数都假设有序变量或二分变量由潜在的正态分布导出。请参考此程序包所附文档以了解更多。

7.3.2　相关性的显著性检验

在计算好相关系数以后，如何对它们进行统计显著性检验呢？常用的原假设为变量间不相关（即总体的相关系数为0）。你可以使用cor.test()函数对单个的Pearson、Spearman和Kendall相关系数进行检验。简化后的使用格式为：

```
cor.test(x, y, alternative = , method = )
```

其中的*x*和*y*为要检验相关性的变量，alternative则用来指定进行双侧检验或单侧检验（取值为"two.side"、"less"或"greater"），而method用以指定要计算的相关类型（"pearson"、"kendall"或"spearman"）。当研究的假设为总体的相关系数小于0时，请使用alternative="less"。在研究的假设为总体的相关系数大于0时，应使用alternative="greater"。在默认

情况下，假设为alternative="two.side"（总体相关系数不等于0）。参考代码清单7-18中的示例。

代码清单7-18 检验某种相关系数的显著性

```
> cor.test(states[,3], states[,5])

        Pearson's product-moment correlation
data:  states[, 3] and states[, 5]
t = 6.85, df = 48, p-value = 1.258e-08
alternative hypothesis: true correlation is not equal to 0
95 percent confidence interval:
 0.528 0.821
sample estimates:
  cor
0.703
```

这段代码检验了预期寿命和谋杀率的Pearson相关系数为0的原假设。假设总体的相关度为0，则预计在一千万次中只会有少于一次的机会见到0.703这样大的样本相关度（即p = 1.258e–08）。由于这种情况几乎不可能发生，所以你可以拒绝原假设，从而支持了要研究的猜想，即预期寿命和谋杀率之间的总体相关度不为0。

遗憾的是，cor.test每次只能检验一种相关关系。但幸运的是，psych包中提供的corr.test()函数可以一次做更多事情。corr.test()函数可以为Pearson、Spearman或Kendall相关计算相关矩阵和显著性水平。代码清单7-19中给出了一个示例。

代码清单7-19 通过corr.test计算相关矩阵并进行显著性检验

```
> library(psych)
> corr.test(states, use="complete")

Call:corr.test(x = states, use = "complete")
Correlation matrix
           Population Income Illiteracy Life Exp Murder HS Grad
Population       1.00   0.21       0.11    -0.07   0.34   -0.10
Income           0.21   1.00      -0.44     0.34  -0.23    0.62
Illiteracy       0.11  -0.44       1.00    -0.59   0.70   -0.66
Life Exp        -0.07   0.34      -0.59     1.00  -0.78    0.58
Murder           0.34  -0.23       0.70    -0.78   1.00   -0.49
HS Grad         -0.10   0.62      -0.66     0.58  -0.49    1.00

Sample Size
[1] 50
Probability value
           Population Income Illiteracy Life Exp Murder HS Grad
Population       0.00   0.15       0.46     0.64   0.01     0.5
Income           0.15   0.00       0.00     0.02   0.11     0.0
Illiteracy       0.46   0.00       0.00     0.00   0.00     0.0
Life Exp         0.64   0.02       0.00     0.00   0.00     0.0
Murder           0.01   0.11       0.00     0.00   0.00     0.0
HS Grad          0.50   0.00       0.00     0.00   0.00     0.0
```

参数use=的取值可为"pairwise"或"complete"（分别表示对缺失值执行成对删除或行删除）。参数method=的取值可为"pearson"（默认值）、"spearman"或"kendall"。这里可以看

到，人口数量和高中毕业率的相关系数（–0.10）并不显著地不为0（p = 0.5）。

其他显著性检验

在7.4.1节中，我们关注了偏相关系数。在多元正态性的假设下，psych包中的pcor.test()函数[①]可以用来检验在控制一个或多个额外变量时两个变量之间的条件独立性。使用格式为：

```
pcor.test(r, q, n)
```

其中的*r*是由pcor()函数计算得到的偏相关系数，*q*为要控制的变量数（以数值表示位置），*n*为样本大小。

在结束这个话题之前应当指出的是，psych包中的r.test()函数提供了多种实用的显著性检验方法。此函数可用来检验：

- 某种相关系数的显著性；
- 两个独立相关系数的差异是否显著；
- 两个基于一个共享变量得到的非独立相关系数的差异是否显著；
- 两个基于完全不同的变量得到的非独立相关系数的差异是否显著。

参阅help(r.test)以了解详情。

7.3.3　相关关系的可视化

以相关系数表示的二元关系可以通过散点图和散点图矩阵进行可视化，而相关图（correlogram）则为以一种有意义的方式比较大量的相关系数提供了一种独特而强大的方法。这些图形将在第11章中详述。

7.4　t检验

在研究中最常见的行为就是对两个组进行比较。接受某种新药治疗的患者是否较使用某种现有药物的患者表现出了更大程度的改善？某种制造工艺是否较另外一种工艺制造出的不合格品更少？两种教学方法中哪一种更有效？如果你的结果变量是类别型的，那么可以直接使用7.3节中阐述的方法。这里我们将关注结果变量为连续型的组间比较，并假设其呈正态分布。

为了阐明方法，我们将使用MASS包中的UScrime数据集。它包含了1960年美国47个州的刑罚制度对犯罪率影响的信息。我们感兴趣的结果变量为Prob（监禁的概率）、U1（14~24岁年龄段城市男性失业率）和U2（35~39岁年龄段城市男性失业率）。类别型变量So（指示该州是否位于南方的指示变量）将作为分组变量使用。数据的尺度已被原始作者缩放过。（注意，我原本打算将本节命名为“旧南方的罪与罚”，但是最后理智还是战胜了情感。）

7.4.1　独立样本的t检验

如果你在美国的南方犯罪，是否更有可能被判监禁？我们比较的对象是南方和非南方各州，

① 这里可能是作者的笔误，函数*pcor.test*事实上包含于*ggm*包中。——译者注

因变量为监禁的概率。一个针对两组的独立样本t检验可以用于检验两个总体的均值相等的假设。这里假设两组数据是独立的，并且是从正态总体中抽得。检验的调用格式为：

```
t.test(y ~ x, data)
```

其中的*y*是一个数值型变量，*x*是一个二分变量。调用格式或为：

```
t.test(y1, y2)
```

其中的*y1*和*y2*为数值型向量（即各组的结果变量）。可选参数data的取值为一个包含了这些变量的矩阵或数据框。与其他多数统计软件不同的是，这里的t检验默认假定方差不相等，并使用Welsh的修正自由度。你可以添加一个参数var.equal=TRUE以假定方差相等，并使用合并方差估计。默认的备择假设是双侧的（即均值不相等，但大小的方向不确定）。你可以添加一个参数alternative="less"或alternative="greater"来进行有方向的检验。

在下列代码中，我们使用了一个假设方差不等的双侧检验，比较了南方（group 1）和非南方（group 0）各州的监禁概率：

```
> library(MASS)
> t.test(Prob ~ So, data=UScrime)

        Welch Two Sample t-test

data:  Prob by So
t = -3.8954, df = 24.925, p-value = 0.0006506
alternative hypothesis: true difference in means is not equal to 0
95 percent confidence interval:
 -0.03852569 -0.01187439
sample estimates:
mean in group 0 mean in group 1
     0.03851265      0.06371269
```

你可以拒绝南方各州和非南方各州拥有相同监禁概率的假设（$p < .001$）。

注意 由于结果变量是一个比例值，你可以在执行t检验之前尝试对其进行正态化变换。在本例中，所有对结果变量合适的变换（Y/1-Y、log(Y/1-Y)、arcsin(Y)、arcsin(sqrt(Y)）都会将检验引向相同的结论。数据变换详述于第8章。

7.4.2 非独立样本的t检验

再举个例子，你可能会问：较年轻（14~24岁）男性的失业率是否比年长（35~39岁）男性的失业率更高？在这种情况下，这两组数据并不独立。你不能说亚拉巴马州的年轻男性和年长男性的失业率之间没有关系。在两组的观测之间相关时，你获得的是一个非独立组设计（dependent groups design）。前-后测设计（pre-post design）或重复测量设计（repeated measures design）同样也会产生非独立的组。

非独立样本的t检验假定组间的差异呈正态分布。对于本例，检验的调用格式为：

```
t.test(y1, y2, paired=TRUE)
```

其中的*y1*和*y2*为两个非独立组的数值向量。结果如下：

```
> library(MASS)
> sapply(UScrime[c("U1","U2")], function(x)(c(mean=mean(x),sd=sd(x))))
       U1    U2
mean 95.5 33.98
sd   18.0  8.45

> with(UScrime, t.test(U1, U2, paired=TRUE))

        Paired t-test

data:  U1 and U2
t = 32.4066, df = 46, p-value < 2.2e-16
alternative hypothesis: true difference in means is not equal to 0
95 percent confidence interval:
 57.67003 65.30870
sample estimates:
mean of the differences
               61.48936
```

差异的均值（61.5）足够大，可以保证拒绝年长和年轻男性的平均失业率相同的假设。年轻男性的失业率更高。事实上，若总体均值相等，获取一个差异如此大的样本的概率小于0.000 000 000 000 000 22（即2.2e–16）。

7.4.3　多于两组的情况

如果想在多于两个的组之间进行比较，应该怎么做？如果能够假设数据是从正态总体中独立抽样而得的，那么你可以使用方差分析（ANOVA）。ANOVA是一套覆盖了许多实验设计和准实验设计的综合方法。就这一点来说，它的内容值得单列一章。你可以随时离开本节转而阅读第9章。

7.5　组间差异的非参数检验

如果数据无法满足t检验或ANOVA的参数假设，可以转而使用非参数方法。举例来说，若结果变量在本质上就严重偏倚或呈现有序关系，那么你可能会希望使用本节中的方法。

7.5.1　两组的比较

若两组数据独立，可以使用Wilcoxon秩和检验（更广为人知的名字是Mann－Whitney U检验）来评估观测是否是从相同的概率分布中抽得的（即，在一个总体中获得更高得分的概率是否比另一个总体要大）。调用格式为：

```
wilcox.test(y ~ x, data)
```

其中的*y*是数值型变量，而x是一个二分变量。调用格式或为：

```
wilcox.test(y1, y2)
```

其中的*y1*和*y2*为各组的结果变量。可选参数data的取值为一个包含了这些变量的矩阵或数据框。默认进行一个双侧检验。你可以添加参数exact来进行精确检验，指定alternative="less"或alternative="greater"进行有方向的检验。

如果你使用Mann - Whitney U检验回答上一节中关于监禁率的问题，将得到这些结果：

```
> with(UScrime, by(Prob, So, median))

So: 0
[1] 0.0382
--------------------
So: 1
[1] 0.0556

> wilcox.test(Prob ~ So, data=UScrime)

        Wilcoxon rank sum test

data:  Prob by So
W = 81, p-value = 8.488e-05
alternative hypothesis: true location shift is not equal to 0
```

你可以再次拒绝南方各州和非南方各州监禁率相同的假设（$p < 0.001$）。

Wilcoxon符号秩检验是非独立样本t检验的一种非参数替代方法。它适用于两组成对数据和无法保证正态性假设的情境。调用格式与Mann - Whitney U检验完全相同，不过还可以添加参数paired=TRUE。让我们用它解答上一节中的失业率问题：

```
> sapply(UScrime[c("U1","U2")], median)
U1 U2
92 34

> with(UScrime, wilcox.test(U1, U2, paired=TRUE))

        Wilcoxon signed rank test with continuity correction

data:  U1 and U2
V = 1128, p-value = 2.464e-09
alternative hypothesis: true location shift is not equal to 0
```

你再次得到了与配对t检验相同的结论。

在本例中，含参的t检验和与其作用相同的非参数检验得到了相同的结论。当t检验的假设合理时，参数检验的功效更强（更容易发现存在的差异）。而非参数检验在假设非常不合理时（如对于等级有序数据）更适用。

7.5.2 多于两组的比较

在要比较的组数多于两个时，必须转而寻求其他方法。考虑7.4节中的state.x77数据集。它包含了美国各州的人口、收入、文盲率、预期寿命、谋杀率和高中毕业率数据。如果你想比较美国四个地区（东北部、南部、中北部和西部）的文盲率，应该怎么做呢？这称为单向设计（one-way

design），我们可以使用参数或非参数的方法来解决这个问题。

如果无法满足ANOVA设计的假设，那么可以使用非参数方法来评估组间的差异。如果各组独立，则Kruskal-Wallis检验将是一种实用的方法。如果各组不独立（如重复测量设计或随机区组设计），那么Friedman检验会更合适。

Kruskal - Wallis检验的调用格式为：

```
kruskal.test(y ~ A, data)
```

其中的*y*是一个数值型结果变量，*A*是一个拥有两个或更多水平的分组变量（grouping variable）。（若有两个水平，则它与Mann - Whitney U检验等价。）而Friedman检验的调用格式为：

```
friedman.test(y ~ A | B, data)
```

其中的*y*是数值型结果变量，*A*是一个分组变量，而*B*是一个用以认定匹配观测的区组变量（blocking variable）。在以上两例中，*data*皆为可选参数，它指定了包含这些变量的矩阵或数据框。

让我们利用Kruskal - Wallis检验回答文盲率的问题。首先，你必须将地区的名称添加到数据集中。这些信息包含在随R基础安装分发的`state.region`数据集中。

```
states <- as.data.frame(cbind(state.region, state.x77))
```

现在就可以进行检验了：

```
> kruskal.test(Illiteracy ~ state.region, data=states)

        Kruskal-Wallis rank sum test

data:  states$Illiteracy by states$state.region
Kruskal-Wallis chi-squared = 22.7, df = 3, p-value = 4.726e-05
```

显著性检验的结果意味着美国四个地区的文盲率各不相同（$p < 0.001$）。

虽然你可以拒绝不存在差异的原假设，但这个检验并没有告诉你哪些地区显著地与其他地区不同。要回答这个问题，你可以使用Mann - Whitney U检验每次比较两组数据。一种更为优雅的方法是在控制犯第一类错误的概率（发现一个事实上并不存在的差异的概率）的前提下，执行可以同步进行的多组比较，这样可以直接完成所有组之间的成对比较。npmc包提供了所需要的非参数多组比较程序。

说实话，我将本章标题中基本的定义拓展了不止一点点，但由于在这里讲非常合适，所以希望你能够容忍我的做法。第一步，请先安装npmc包。此包中的npmc()函数接受的输入为一个两列的数据框，其中一列名为var（因变量），另一列名为class（分组变量）。代码清单7-20中包含了可以用来完成计算的代码。

代码清单7-20　非参数多组比较

```
> class <- state.region
> var <- state.x77[,c("Illiteracy")]
> mydata <- as.data.frame(cbind(class, var))
> rm(class, var)
> library(npmc)
> summary(npmc(mydata), type="BF")
```

```
$'Data-structure'
              group.index   class.level nobs
Northeast                1     Northeast    9
South                    2         South   16
North Central            3 North Central   12
West                     4          West   13

$'Results of the multiple Behrens-Fisher-Test'
  cmp effect lower.cl upper.cl p.value.1s p.value.2s
1 1-2 0.8750  0.66149   1.0885   0.000665    0.00135
2 1-3 0.1898 -0.13797   0.5176   0.999999    0.06547
3 1-4 0.3974 -0.00554   0.8004   0.998030    0.92004
4 2-3 0.0104 -0.02060   0.0414   1.000000    0.00000
5 2-4 0.1875 -0.07923   0.4542   1.000000    0.02113
6 3-4 0.5641  0.18740   0.9408   0.797198    0.98430

> aggregate(mydata, by=list(mydata$class), median)
  Group.1 class  var
1       1     1 1.10
2       2     2 1.75
3       3     3 0.70
4       4     4 0.60
```

❶ 成对组间比较结果

❷ 各类别的文盲率中间值

调用了npmc的语句生成了六对统计比较结果（东北部对南部、东北部对中北部、东北部对西部、南部对中北部、南部对西部，以及中北部对西部）❶。可以从双侧的p值（p.value.2s）看出南部与其他三个地区显著不同，而其他三个地区之间并没有什么不同。在❷处可以看到南部的文盲率中间值更高。注意，npmc在计算积分时使用了随机数，所以每次计算的结果会有轻微的不同。

7.6 组间差异的可视化

在7.4节和7.5节中，我们关注了进行组间比较的统计方法。使用视觉直观地检查组间差异，同样是全面的数据分析策略中的一个重要组成部分。它允许你评估差异的量级、甄别出任何会影响结果的分布特征（如偏倚、双峰或离群点）并衡量检验假定的合理程度。R中提供了许多比较组间数据的图形方法，其中包括6.5节中讲解的箱线图（简单箱线图、含凹槽的箱线图、小提琴图）、6.4.1节中叠加的核密度图，以及在第9章中讨论的评估检验假定的图形方法。

7.7 小结

在本章中，我们评述了R中用于生成统计概要和进行假设检验的函数。我们关注了样本统计量和频数表、独立性检验和类别型变量的相关性度量、定量变量的相关系数（和连带的显著性检验）以及两组或更多组定量结果变量的比较。

下一章中，我们将探索一元回归和多元回归，讨论的焦点在于如何理解一个预测变量（一元回归）或多个预测变量（多元回归）与某个被预测变量或效标变量（criterion variable）之间的关系。图形将有助于诊断潜在的问题、评估和提高模型的拟合精度，并发现数据中意料之外的信息瑰宝。

Part 3 第三部分

中级方法

第二部分涵盖了作图和统计的基本方法，主要是对两个变量的关系进行描述性分析，第三部分将介绍一些中级方法，讲解如何对数值型结果变量和一系列数值型和（或）类别型预测变量之间的关系进行建模。

第 8 章介绍对数值型结果变量和单个或多个预测变量间的关系进行建模的回归方法。由于建模通常都是一个复杂、多步骤、交互的过程，因此第 8 章将逐步讲解如何拟合线性模型、评价模型适用性，并解释模型的意义。

第 9 章介绍基于方差分析及其变体对基本实验和准实验设计的分析。在这一章，我们感兴趣的是处理方式的组合，或条件对数值型结果变量的影响。这一章介绍 R 函数在方差分析、协方差分析、重复测量方差分析、多因素方差分析和多元方差分析中的用法，同时还讨论模型适用性的评价方法以及结果的可视化。

在实验和准实验设计中，判断样本量对检测处理效果是否足够（功效分析）非常重要——否则，为何要做这些研究呢？第 10 章详细介绍功效分析。在讨论假设检验后，这一章的重点是如何使用 R 函数判断：在给定置信度的前提下，需要多少样本才能判断处理效果。这个结论可以帮助我们安排实验和准实验研究来获得有用的结果。

第 11 章扩展了第 5 章的内容，涵盖有助于两个或多个变量间关系可视化的图形绘制，包括各种 2D 和 3D 的散点图、散点图矩阵、折线图、气泡图，以及实用但相对少为人知的相关图和马赛克图。

在第 8 章和第 9 章中，回归模型的假设条件很苛刻：结果或响应变量不仅是数值型的，而且还必须来自正态分布的随机抽样。但很多情况并不满足正态分布假设，第 12 章便为此介绍一些稳健的数据分析方法，它们能处理比较复杂的情况，比如数据来源于未知或混合分布、小样本问题、恼人的异常值，或者依据理论分布设计假设检验很复杂而且数学上非常难处理。这一章介绍的方法包括重抽样和自助法，这些涉及大量计算机资源的方法很容易在 R 中实现，允许你对那些不符合传统参数假设的数据去修正假设检验。

阅毕第三部分，你将可以运用这些工具分析常见的实际数据分析问题，而且还可以绘制一些非常漂亮的图形！

第8章 回　归

本章内容

- 拟合并解释线性模型
- 检验模型假设
- 模型选择

从许多方面来看，回归分析都是统计学的核心。它其实是一个广义的概念，通指那些用一个或多个预测变量（也称自变量或解释变量）来预测响应变量（也称因变量、效标变量或结果变量）的方法。通常，回归分析可以用来挑选与响应变量相关的解释变量，可以描述两者的关系，也可以生成一个等式，通过解释变量来预测响应变量。

例如，一个运动生理学家可通过回归分析获得一个等式，预测一个人在跑步机上锻炼时预期消耗的卡路里数。响应变量即消耗的卡路里数（可通过耗氧量计算获得），预测变量则可能包括锻炼的时间（分）、处于目标心率的时间比、平均速度（英里/小时）、年龄（年）、性别和身体质量指数（BMI）。

从理论的角度来看，回归分析可以帮助解答以下疑问。

- 锻炼时间与消耗的卡路里数是什么关系？是线性的还是曲线的？比如，卡路里消耗到某个点后，锻炼对卡路里的消耗影响会变小吗？
- 耗费的精力（处于目标心率的时间比，平均行进速度）将被如何计算在内？
- 这些关系对年轻人和老人、男性和女性、肥胖和苗条的人同样适用吗？

从实际的角度来看，回归分析则可以帮助解答以下疑问。

- 一名30岁的男性，BMI为28.7，如果以每小时4英里的速度行走45分钟，并且80%的时间都在目标心率内，那么他会消耗多少卡路里呢？
- 为了准确预测一个人行走时消耗的卡路里数，你需要收集的变量最少是多少个？
- 预测的准确度可以达到多少？

由于回归分析在现代统计学中非常重要，本章将对其进行一些深度讲解。首先，我们将看一看如何拟合和解释回归模型，然后回顾一系列鉴别模型潜在问题的方法，并学习如何解决它们。其次，我们将探究变量选择问题。对于所有可用的预测变量，如何确定哪些变量包含在最终的模型中？再次，我们将讨论一般性问题。模型在现实世界中的表现到底如何？最后，我们

再看看相对重要性问题。模型所有的预测变量中，哪一个最重要，哪一个第二重要，哪一个最无关紧要？

正如你所看到的，我们会涵盖许多方面的内容。有效的回归分析本就是一个交互的、整体的、多步骤的过程，而不仅仅是一点技巧。为此，本书并不将它分散到多个章中进行讲解，而是用单独的一章来讨论。因此，这一章将成为本书最长最复杂的一章。只要坚持到最后，我保证你一定可以掌握所有的工具，自如地处理许多研究性问题！

8.1 回归的多面性

回归是一个令人困惑的词，因为它有许多特殊变种（见表8-1）。对于回归模型的拟合，R提供的强大而丰富的功能和选项也同样令人困惑。例如，2005年Vito Ricci创建的列表表明，R中做回归分析的函数已超过了205个（http://cran.r-project.org/doc/contrib/Ricci-refcardregression.pdf）。

表8-1 回归分析的各种变体

回归类型	用 途
简单线性	用一个量化的解释变量预测一个量化的响应变量
多项式	用一个量化的解释变量预测一个量化的响应变量，模型的关系是n阶多项式
多元线性	用两个或多个量化的解释变量预测一个量化的响应变量
多变量	用一个或多个解释变量预测多个响应变量
Logistic	用一个或多个解释变量预测一个类别型响应变量
泊松	用一个或多个解释变量预测一个代表频数的响应变量
Cox比例风险	用一个或多个解释变量预测一个事件（死亡、失败或旧病复发）发生的时间
时间序列	对误差项相关的时间序列数据建模
非线性	用一个或多个量化的解释变量预测一个量化的响应变量，不过模型是非线性的
非参数	用一个或多个量化的解释变量预测一个量化的响应变量，模型的形式源自数据形式，不事先设定
稳健	用一个或多个量化的解释变量预测一个量化的响应变量，能抵御强影响点的干扰

在这一章中，我们的重点是普通最小二乘（OLS）回归法，包括简单线性回归、多项式回归和多元线性回归。OLS回归是现今最常见的统计分析方法，其他回归模型（Logistic回归和泊松回归）将在第13章介绍。

8.1.1 OLS回归的适用情境

OLS回归是通过预测变量的加权和来预测量化的因变量，其中权重是通过数据估计而得的参数。现在让我们一起看一个改编自Fwa（2006）的具体示例（此处没有任何含沙射影之意）。

一个工程师想找出跟桥梁退化有关的最重要的因素，比如使用年限、交通流量、桥梁设计、建造材料和建造方法、建造质量以及天气情况，并确定它们之间的数学关系。他从一个有代表性的桥梁样本中收集了这些变量的相关数据，然后使用OLS回归对数据进行建模。

这种方法的交互性很强。他拟合了一系列模型，检验它们是否符合相应的统计假设，探索了所有异常的发现，最终从许多可能的模型中选择了“最佳”的模型。如果成功，那么结果将会帮助他完成以下任务。

- 在众多变量中判断哪些对预测桥梁退化是有用的，得到它们的相对重要性，从而关注重要的变量。
- 根据回归所得的等式预测新的桥梁的退化情况（预测变量的值已知，但是桥梁退化程度未知），找出那些可能会有麻烦的桥梁。
- 利用对异常桥梁的分析，获得一些意外的信息。比如他发现某些桥梁的退化速度比预测的更快或更慢，那么研究这些“离群点”可能会有重大的发现，能够帮助理解桥梁退化的机制。

可能桥梁的例子并不能引起你的兴趣。而我是从事临床心理学和统计的，对土木工程也是一无所知，但是这其中蕴含的一般性思想适用于物理、生物和社会科学的许多问题。以下问题都可以通过OLS方法进行处理。

- 铺路表面的面积与表面盐度有什么关系（Montogomery，2007）？
- 一个用户哪些方面的经历会导致他沉溺于大型多人在线角色扮演游戏（MMORPG；Hsu，Wen& Wu，2009）？
- 教育环境中的哪些因素与最能影响学生成绩得分？
- 血压、盐摄入量和年龄的关系是什么样的？对于男性和女性是相同的吗？
- 运动场馆和职业运动对大都市的发展有何影响（Baade & Dye，1990）？
- 哪些因素可以解释各州的啤酒价格差异（Culbertson & Bradford，1991）？（这个问题终于引起了你的注意！）

我们主要的困难有三个：发现有趣的问题， 设计一个有用的、可以测量的响应变量，以及收集合适的数据。

8.1.2　基础回顾

下面的几节，我将介绍如何用R函数拟合OLS回归模型、评价拟合优度、检验假设条件以及选择模型。此处假定读者已经在本科统计课程第二学期接触了最小二乘回归法，不过，我还是会尽量少用数学符号，关注实际运用而不是理论细节。有大量优秀书籍都介绍了本章提到的统计知识。我最喜欢的是John Fox的*Applied Regression Analysis and Generalized Linear Models*（偏重理论）和*An R and S-Plus Companion to Applied Regression*（偏重应用），它们为本章提供了主要的素材。另外，一份不错的非技术性综述可参考Licht（1995）。

8.2　OLS 回归

在本章大部分内容中，我们都是利用OLS法通过一系列的预测变量来预测响应变量（也可以说是在预测变量上“回归”响应变量——其名也因此而来）。OLS回归拟合模型的形式：

$$\hat{Y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_{1i} + \cdots + \hat{\beta}_k X_{ki} \quad i = 1 \cdots n$$

其中，n为观测的数目，k为预测变量的数目。（虽然我极力避免讨论公式，但这里探讨公式是简化问题的需要。）等式中相应部分的解释如下。

$\hat{Y}_i$	第i次观测对应的因变量的预测值（具体来讲，它是在已知预测变量值的条件下，对Y分布估计的均值）
X_{ji}	第i次观测对应的第j个预测变量值
$\hat{\beta}_0$	截距项（当所有的预测变量都为0时，Y的预测值）
$\hat{\beta}_j$	预测变量j的回归系数（斜率表示X_j改变一个单位所引起的Y的改变量）

我们的目标是通过减少响应变量的真实值与预测值的差值来获得模型参数（截距项和斜率）。具体而言，即使得残差平方和最小。

$$\sum_1^n \left(Y_i - \hat{Y}_i\right)^2 = \sum_1^n \left(Y_i \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X_{1i} + \cdots + \hat{\beta}_k X_{ki}\right)^2 = \sum_1^n \varepsilon^2$$

为了能够恰当地解释OLS模型的系数，数据必须满足以下统计假设。

- **正态性** 对于固定的自变量值，因变量值成正态分布。
- **独立性** Y_i值之间相互独立。
- **线性** 因变量与自变量之间为线性相关。
- **同方差性** 因变量的方差不随自变量的水平不同而变化。也可称作不变方差，但是说同方差性感觉上更犀利。

如果违背了以上假设，你的统计显著性检验结果和所得的置信区间很可能就不精确。注意，OLS回归还假定自变量是固定的且测量无误差，但在实践中通常都放松了这个假设。

8.2.1 用lm()拟合回归模型

在R中，拟合线性模型最基本的函数就是lm()，格式为：

```
myfit <- lm(formula, data)
```

其中，*formula*指要拟合的模型形式，*data*是一个数据框，包含了用于拟合模型的数据。结果对象（本例中是myfit）存储在一个列表中，包含了所拟合模型的大量信息。表达式（formula）形式如下：

```
Y ~ X1 + X2 + ··· + Xk
```

~左边为响应变量，右边为各个预测变量，预测变量之间用+符号分隔。表8-2中的符号可以不同方式修改这一表达式。

除了lm()，表8-3还列出了其他一些对做简单或多元回归分析有用的函数。拟合模型后，将这些函数应用于lm()返回的对象，可以得到更多额外的模型信息。

表8-2　R表达式中常用的符号

符　号	用　途
~	分隔符号，左边为响应变量，右边为解释变量。例如，要通过x、z和w预测y，代码为y ~ x + z + w
+	分隔预测变量
:	表示预测变量的交互项。例如，要通过x、z及x与z的交互项预测y，代码为y ~ x + z + x:z
*	表示所有可能交互项的简洁方式。代码y~ x * z * w可展开为y ~ x + z + w + x:z + x:w + z:w + x:z:w
^	表示交互项达到某个次数。代码y ~ (x + z + w)^2可展开为y ~ x + z + w + x:z + x:w + z:w
.	表示包含除因变量外的所有变量。例如，若一个数据框包含变量x、y、z和w，代码y~.可展开为y ~ x + z + w
-	减号，表示从等式中移除某个变量。例如，y ~ (x + z + w)^2 - x:w可展开为y ~ x + z + w + x:z + z:w
-1	删除截距项。例如，表达式y ~ x - 1拟合y在x上的回归，并强制直线通过原点
I()	从算术的角度来解释括号中的元素。例如，y~x+(z+w)^2将展开为y~x+z+w+z:w。相反，代码y ~ x + I((z + w)^2)将展开为y ~ x + h，h是一个由z和w的平方和创建的新变量
function	可以在表达式中用的数学函数。例如，log(y) ~ x + z + w表示通过x、z和w来预测log(y)

表8-3　对拟合线性模型非常有用的其他函数

函　数	用　途
summary()	展示拟合模型的详细结果
coefficients()	列出拟合模型的模型参数（截距项和斜率）
confint()	提供模型参数的置信区间（默认95%）
fitted()	列出拟合模型的预测值
residuals()	列出拟合模型的残差值
anova()	生成一个拟合模型的方差分析表，或者比较两个或更多拟合模型的方差分析表
vcov()	列出模型参数的协方差矩阵
AIC()	输出赤池信息统计量
plot()	生成评价拟合模型的诊断图
predict()	用拟合模型对新的数据集预测响应变量值

当回归模型包含一个因变量和一个自变量时，我们称为简单线性回归。当只有一个预测变量，但同时包含变量的幂（比如，X、X^2、X^3）时，我们称之为多项式回归。当有不止一个预测变量时，则称为多元线性回归。现在，我们首先从一个简单的线性回归例子开始，然后逐步展示多项式回归和多元线性回归，最后还会介绍一个包含交互项的多元线性回归的例子。

8.2.2　简单线性回归

让我们通过一个回归示例来熟悉表8-3中的函数。基础安装中的数据集women提供了15个年龄在30~39岁间女性的身高和体重信息，我们想通过身高来预测体重，获得一个等式可以帮助我

们分辨出那些过重或过瘦的个体。代码清单8-1提供了分析过程，图8-1展示了结果图形。

代码清单8-1 简单线性回归

```
> fit <- lm(weight ~ height, data=women)
> summary(fit)
Call:
lm(formula=weight ~ height, data=women)

Residuals:
   Min      1Q Median      3Q     Max
-1.733 -1.133 -0.383  0.742  3.117

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -87.5167     5.9369   -14.7  1.7e-09 ***
height        3.4500     0.0911    37.9  1.1e-14 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '' 1

Residual standard error: 1.53 on 13 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.991,      Adjusted R-squared: 0.99
F-statistic: 1.43e+03 on 1 and 13 DF,  p-value: 1.09e-14

> women$weight

 [1] 115 117 120 123 126 129 132 135 139 142 146 150 154 159 164

> fitted(fit)

     1      2      3      4      5      6      7      8      9
112.58 116.03 119.48 122.93 126.38 129.83 133.28 136.73 140.18
    10     11     12     13     14     15
143.63 147.08 150.53 153.98 157.43 160.88

> residuals(fit)

    1     2     3     4     5     6     7     8     9    10    11
 2.42  0.97  0.52  0.07 -0.38 -0.83 -1.28 -1.73 -1.18 -1.63 -1.08
   12    13    14    15
-0.53  0.02  1.57  3.12

> plot(women$height,women$weight,
    xlab="Height (in inches)",
    ylab="Weight (in pounds)")
> abline(fit)
```

通过输出结果，可以得到预测等式：

$$\widehat{\text{Weight}} = -87.52 + 3.45 \times Height$$

因为身高不可能为0，你没必要给截距项一个物理解释，它仅仅是一个常量调整项。在Pr(>|t|)栏，可以看到回归系数（3.45）显著不为0（p<0.001），表明身高每增高1英寸，体重将预期增加

3.45磅[①]。R平方项（0.991）表明模型可以解释体重99.1%的方差，它也是实际和预测值之间的相关系数（$R^2 = r^2_{\hat{Y}Y}$）。残差标准误（1.53 lbs）则可认为是模型用身高预测体重的平均误差。F统计量检验所有的预测变量预测响应变量是否都在某个几率水平之上。由于简单回归只有一个预测变量，此处F检验等同于身高回归系数的t检验。

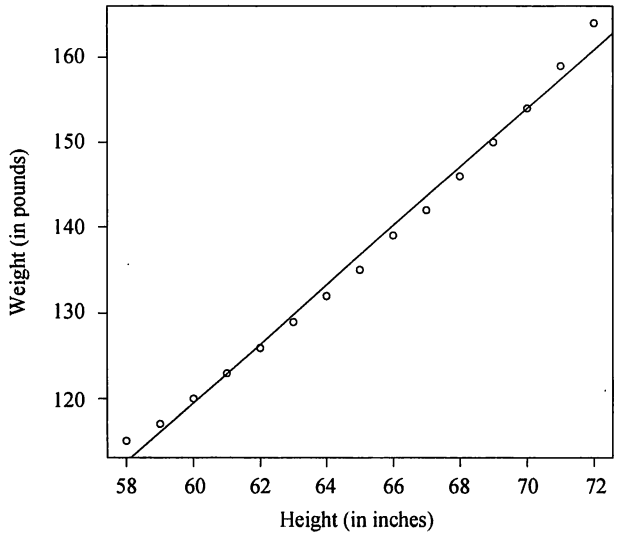


图8-1　用身高预测体重的散点图以及回归线

为了展示的需要，我们已经输出了真实值、预测值和残差值。显然，最大的残差值在身高矮和身高高的地方出现，这也可以从图8-1看出来。

图形表明你可以用含一个弯曲的曲线来提高预测的精度。比如，模型$\hat{Y} = \beta_0 + \beta_1 X + \beta_1 X^2$就能更好地拟合数据。多项式回归允许你用一个解释变量预测一个响应变量，它们关系的形式即n次多项式。

8.2.3　多项式回归

图8-1表明，你可以通过添加一个二次项（即X^2）来提高回归的预测精度。

如下代码可以拟合含二次项的等式：

```
fit2 <- lm(weight ~ height + I(height^2), data=women)
```

`I(height^2)`表示向预测等式添加一个身高的平方项。`I`函数将括号的内容看做R的一个常规表达式。因为^（参见表8-2）符号在表达式中有特殊的含义，会调用你并不需要的东西，所以此处必须要用这个函数。

代码清单8-2展示了拟合含二次项等式的结果。

① 1英寸≈2.54厘米，1磅≈0.45千克。——编者注

代码清单8-2 多项式回归

```
> fit2 <- lm(weight ~ height + I(height^2), data=women)
> summary(fit2)

Call:
lm(formula=weight ~ height + I(height^2), data=women)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-0.5094 -0.2961 -0.0094  0.2862  0.5971

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 261.87818   25.19677   10.39  2.4e-07 ***
height       -7.34832    0.77769   -9.45  6.6e-07 ***
I(height^2)   0.08306    0.00598   13.89  9.3e-09 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.384 on 12 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.999,      Adjusted R-squared: 0.999
F-statistic: 1.14e+04 on 2 and 12 DF,  p-value: <2e-16

> plot(women$height,women$weight,
    xlab="Height (in inches)",
    ylab="Weight (in lbs)")
> lines(women$height,fitted(fit2))
```

新的预测等式为：

$$\widehat{\text{Weight}} = 261.88 - 7.35 \times Height + 0.083 \times Height^2$$

在p<0.001水平下，回归系数都非常显著。模型的方差解释率已经增加到了99.9%。二次项的显著性（t = 13.89，p<0.001）表明包含二次项提高了模型的拟合度。从图8-2也可以看出曲线确实拟合得较好。

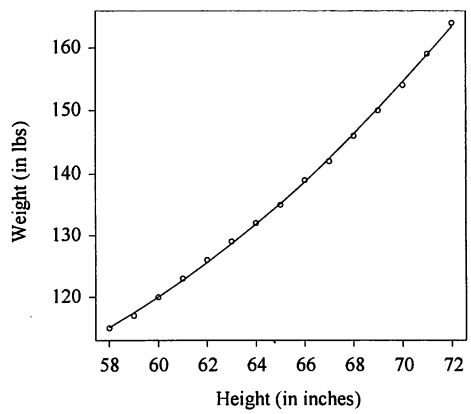


图8-2 用身高预测体重的二次回归

线性模型与非线性模型

多项式等式仍可认为是线性回归模型，因为等式仍是预测变量的加权和形式（本例中是身高和身高的平方）。即使这样的模型：

$$\hat{Y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \times \log X_1 + \hat{\beta}_2 \times \sin X_2$$

仍可认为是线性模型（参数项是线性的），能用这样的表达式进行拟合：

$$Y \sim \log(X_1) + \sin(X_2)$$

相反，下面的例子才能算是真正的非线性模型：

$$Y_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 e^{\frac{x}{\hat{\beta}_2}}$$

这种非线性模型可用nls()函数进行拟合。

一般来说，n次多项式生成一个n–1个弯曲的曲线。拟合三次多项式，可用：

```
fit3 <- lm(weight ~ height + I(height^2) +I(height^3), data=women)
```

虽然更高次的多项式也可用，但我发现使用比三次更高的项几乎没有必要。

在继续下文之前，我还得提及car包中的scatterplot()函数，它可以很容易、方便地绘制二元关系图。以下代码能生成图8-3所示的图形。

```
library(car)
scatterplot(weight ~ height,
  data=women,
  spread=FALSE, lty.smooth=2,
  pch=19,
  main="Women Age 30-39",
  xlab="Height (inches)",
  ylab="Weight (lbs.)")
```

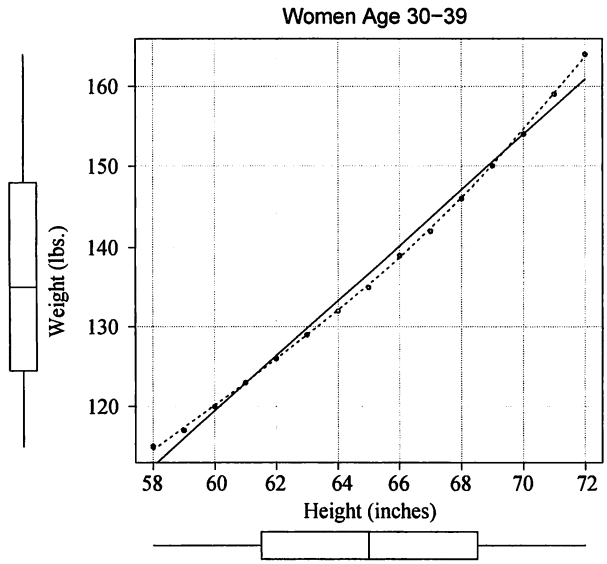


图8-3　身高与体重的散点图。直线为线性拟合，虚线为曲线平滑拟合，边界为箱线图

这个功能加强的图形，既提供了身高与体重的散点图、线性拟合曲线和平滑拟合（loess）曲线，还在相应边界展示了每个变量的箱线图。spread=FALSE选项删除了残差正负均方根在平滑曲线上的展开和非对称信息。lty.smooth=2选项设置loess拟合曲线为虚线。pch=19选项设置点为实心圆（默认为空心圆）。粗略地看一下图8-3可知，两个变量基本对称，曲线拟合得比直线更好。

8.2.4 多元线性回归

当预测变量不止一个时，简单线性回归就变成了多元线性回归，分析也稍微复杂些。从技术上来说，多项式回归可以算是多元线性回归的特例：二次回归有两个预测变量（X和X^2），三次回归有三个预测变量（X、X^2和X^3）。现在让我们看一个更一般的例子。

以基础包中的state.x77数据集为例，我们想探究一个州的犯罪率和其他因素的关系，包括人口、文盲率、平均收入和结霜天数（温度在冰点以下的平均天数）。

因为lm()函数需要一个数据框（state.x77数据集是矩阵），为了以后处理方便，你需要做如下转化：

```
states <- as.data.frame(state.x77[,c("Murder", "Population",
         "Illiteracy", "Income", "Frost")])
```

这行代码创建了一个名为states的数据框，包含了我们感兴趣的变量。本章的余下部分，我们都将使用这个新的数据框。

多元回归分析中，第一步最好检查一下变量间的相关性。cor()函数提供了二变量之间的相关系数，car包中scatterplotMatrix()函数则会生成散点图矩阵（参见代码清单8-3和图8-4）。

代码清单8-3 检测二变量关系

```
> cor(states)
           Murder Population Illiteracy Income Frost
Murder       1.00       0.34       0.70  -0.23 -0.54
Population   0.34       1.00       0.11   0.21 -0.33
Illiteracy   0.70       0.11       1.00  -0.44 -0.67
Income      -0.23       0.21      -0.44   1.00  0.23
Frost       -0.54      -0.33      -0.67   0.23  1.00

> library(car)
> scatterplotMatrix(states, spread=FALSE, lty.smooth=2,
    main="Scatter Plot Matrix")
```

scatterplotMatrix()函数默认在非对角线区域绘制变量间的散点图，并添加平滑（loess）和线性拟合曲线。对角线区域绘制每个变量的密度图和轴须图。

从图中可以看到，谋杀率是双峰的曲线，每个预测变量都一定程度上出现了偏斜。谋杀率随着人口和文盲率的增加而增加，随着收入水平和结霜天数增加而下降。同时，越冷的州府文盲率越低，收入水平越高。

现在使用lm()函数拟合多元线性回归模型（参见代码清单8-4）。

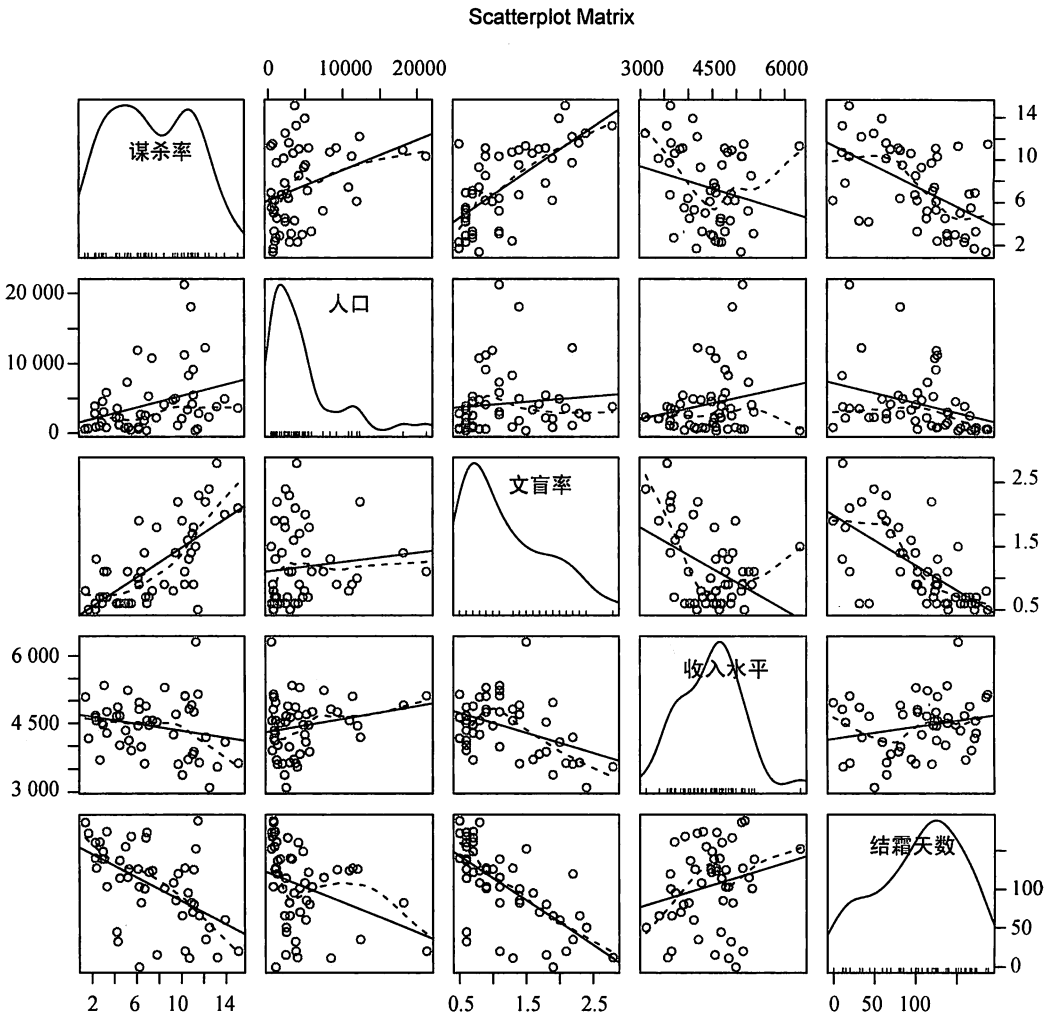


图8-4　州府数据中因变量与自变量的散点图矩阵。［包含线性和平滑拟合曲线，以及相应的边际分布（核密度图和轴须图）］

代码清单8-4　多元线性回归

```
> fit <- lm(Murder ~ Population + Illiteracy + Income + Frost,
            data=states)
> summary(fit)

Call:
lm(formula=Murder ~ Population + Illiteracy + Income + Frost,
    data=states)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-4.7960 -1.6495 -0.0811  1.4815  7.6210
```

```
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 1.23e+00   3.87e+00    0.32    0.751
Population  2.24e-04   9.05e-05    2.47    0.017 *
Illiteracy  4.14e+00   8.74e-01    4.74  2.2e-05 ***
Income      6.44e-05   6.84e-04    0.09    0.925
Frost       5.81e-04   1.01e-02    0.06    0.954
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.5 on 45 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.567,      Adjusted R-squared: 0.528
F-statistic: 14.7 on 4 and 45 DF,  p-value: 9.13e-08
```

当预测变量不止一个时，回归系数的含义为，一个预测变量增加一个单位，其他预测变量保持不变时，因变量将要增加的数量。例如本例中，文盲率的回归系数为4.14，表示控制人口、收入和温度不变时，文盲率上升1%，谋杀率将会上升4.14%，它的系数在p<0.001的水平下显著不为0。相反，Frost的系数没有显著不为0（p=0.954），表明当控制其他变量不变时，Frost与Murder不呈线性相关。总体来看，所有的预测变量解释了各州谋杀率57%的方差。

以上分析中，我们没有考虑预测变量的交互项，在接下来的章节中，我们将考虑一个包含此因素的例子。

8.2.5 有交互项的多元线性回归

许多很有趣的研究都会涉及交互项的预测变量。以mtcars数据框中的汽车数据为例，若你对汽车重量和马力感兴趣，可以把它们作为预测变量，并包含交互项来拟合回归模型，参见代码清单8-5。

代码清单8-5 有显著交互项的多元线性回归

```
> fit <- lm(mpg ~ hp + wt + hp:wt, data=mtcars)
> summary(fit)

Call:
lm(formula=mpg ~ hp + wt + hp:wt, data=mtcars)

Residuals:
   Min     1Q Median     3Q    Max
-3.063 -1.649 -0.736  1.421  4.551

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 49.80842    3.60516   13.82  5.0e-14 ***
hp          -0.12010    0.02470   -4.86  4.0e-05 ***
wt          -8.21662    1.26971   -6.47  5.2e-07 ***
hp:wt        0.02785    0.00742    3.75  0.00081 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.1 on 28 degrees of freedom
```

```
Multiple R-squared: 0.885,      Adjusted R-squared: 0.872
F-statistic: 71.7 on 3 and 28 DF,  p-value: 2.98e-13
```

你可以看到Pr(>|t|)栏中，马力与车重的交互项是显著的，这意味着什么呢？若两个预测变量的交互项显著，说明响应变量与其中一个预测变量的关系依赖于另外一个预测变量的水平。因此此例说明，每加仑汽油行驶英里数与汽车马力的关系依车重不同而不同。

预测mpg的模型为$\widehat{mpg} = 49.81 - 0.12 \times hp - 8.22 \times wt + 0.03 \times hp \times wt$。为更好地理解交互项，你可以赋给wt不同的值，并简化等式。例如，可以试试wt的均值（3.2），少于均值一个标准差和多于均值一个标准差的值（分别是2.2和4.2）。若wt = 2.2，则等式可以化简为$\widehat{mpg} = 49.81 - 0.12 \times hp - 8.22 \times (2.2) + 0.03 \times hp \times (2.2) = 31.41 - 0.06 \times hp$；若wt = 3.2，则变成了$\widehat{mpg} = 23.37 - 0.03 \times hp$；若wt = 4.2，则等式为$\widehat{mpg} = 15.33 - 0.003 \times hp$。你将发现，随着车重增加（2.2、3.2、4.2），hp每增加一个单位引起的mpg预期改变却在减少（0.06、0.03、0.003）。

通过effects包中的effect()函数，你可以用图形展示交互项的结果。格式为：

```
plot(effect(term, mod, xlevels),
   multiline=TRUE)
```

*term*即模型要画的项，*mod*为通过lm()拟合的模型，*xlevels*是一个列表，指定变量要设定的常量值，multiline=TRUE选项表示添加相应直线。对于上例，即：

```
library(effects)
plot(effect("hp:wt", fit,
   list(wt=c(2.2,3.2,4.2))),
   multiline=TRUE)
```

结果展示在图8-5中。

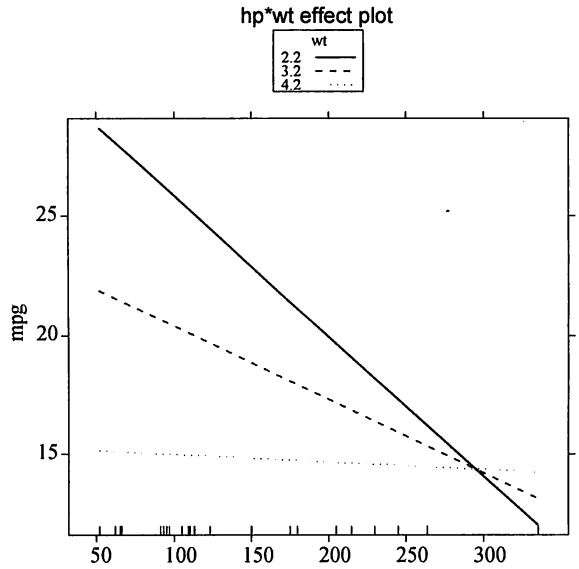


图8-5　hp*wt的交互项图形。图形展示了wt三种值时mpg和hp的关系

从图中可以很清晰地看出，随着车重的增加，马力与每加仑汽油行驶英里数的关系减弱了。当wt = 4.2时，直线几乎是水平的，表明随着hp的增加，mpg不会发生改变。

然而，拟合模型只不过是分析的第一步，一旦拟合了回归模型，在信心十足地进行推断之前，必须对方法中暗含的统计假设进行检验。这正是下节的主题。

8.3 回归诊断

在上一节中，你使用lm()函数来拟合OLS回归模型，通过summary()函数获取模型参数和相关统计量。但是，没有任何输出告诉你模型是否合适，你对模型参数推断的信心依赖于它在多大程度上满足OLS模型统计假设。虽然在代码清单8-4中summary()函数对模型有了整体的描述，但是它没有提供关于模型在多大程度上满足统计假设的任何信息。

为什么这很重要？因为数据的无规律性或者错误设定了预测变量与响应变量的关系，都将致使你的模型产生巨大的偏差。一方面，你可能得出某个预测变量与响应变量无关的结论，但事实上，它们相关；另一方面，情况可能恰好相反。当你的模型应用到真实世界中时，预测效果可能很差，误差显著。

现在让我们通过confint()函数的输出来看看8.2.4节中states多元回归的问题。

```
> fit <- lm(Murder ~ Population + Illiteracy + Income + Frost, data=states)
> confint(fit)
               2.5 %   97.5 %
(Intercept) -6.55e+00 9.021318
Population   4.14e-05 0.000406
Illiteracy   2.38e+00 5.903874
Income      -1.31e-03 0.001441
Frost       -1.97e-02 0.020830
```

结果表明，文盲率改变1%，谋杀率就在95%的置信区间[2.38,5.90]中变化。另外，因为Frost的置信区间包含0，可以得出结论说，当其他变量不变时，温度的改变与谋杀率无关。不过，你对这些结果的信念，都只建立在你的数据满足统计假设的前提之上。

回归诊断技术向你提供了评价回归模型适用性的必要工具，它能帮助发现并纠正问题。首先，我们探讨使用R基础包中函数的标准方法，然后再看看car包中改进了的新方法。

8.3.1 标准方法

R基础安装中提供了大量检验回归分析中统计假设的方法。最常见的方法就是对lm()函数返回的对象使用plot()函数，可以生成评价模型拟合情况的四幅图形。下面是简单线性回归的例子：

```
fit <- lm(weight ~ height, data=women)
par(mfrow=c(2,2))
plot(fit)
```

生成图形见图8-6。par(mfrow = c(2, 2))将plot()函数绘制的四幅图形组合在一个大的2×2的图中。par()函数的介绍可参见第3章。

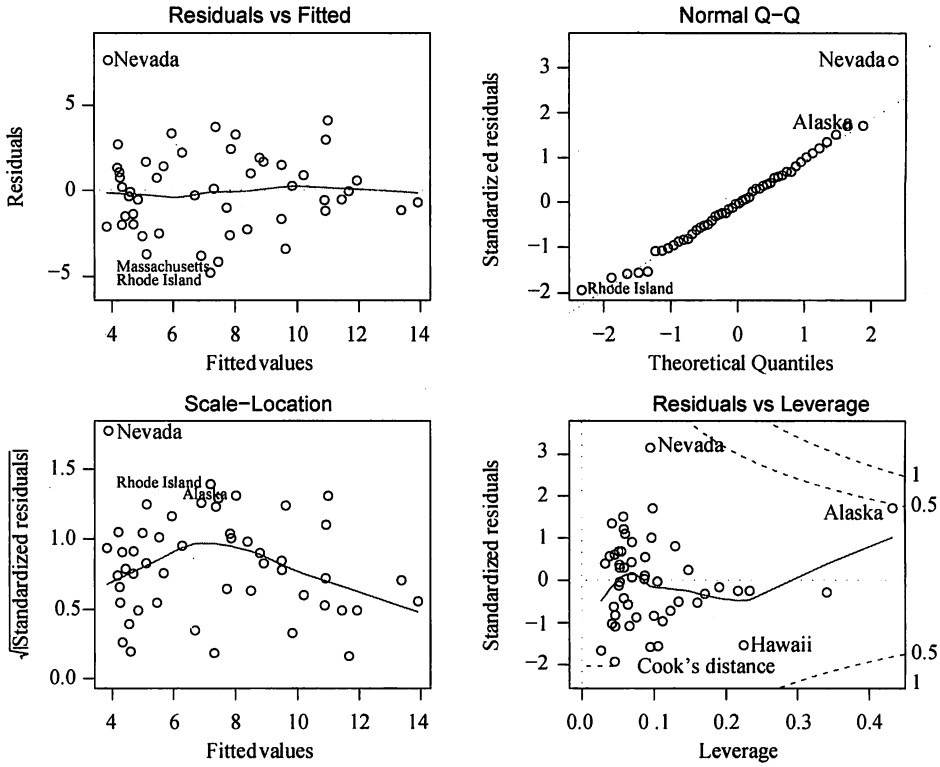


图8-6　体重对身高回归的诊断图

为理解这些图形，我们来回顾一下OLS回归的统计假设。

- **正态性**　当预测变量值固定时，因变量成正态分布，则残差值也应该是一个均值为0的正态分布。正态Q-Q图（Normal Q-Q，右上）是在正态分布对应的值下，标准化残差的概率图。若满足正态假设，那么图上的点应该落在呈45度角的直线上；若不是如此，那么就违反了正态性的假设。
- **独立性**　你无法从这些图中分辨出因变量值是否相互独立，只能从收集的数据中来验证。上面的例子中，没有任何先验的理由去相信一位女性的体重会影响另外一位女性的体重。假若你发现数据是从一个家庭抽样得来的，那么可能必须要调整模型独立性的假设。
- **线性**　若因变量与自变量线性相关，那么残差值与预测（拟合）值就没有任何系统关联。换句话说，除了白噪声，模型应该包含数据中所有的系统方差。在“残差图与拟合图”（Residuals vs Fitted，左上）中可以清楚的看到一个曲线关系，这暗示着你可能需要对回归模型加上一个二次项。
- **同方差性**　若满足不变方差假设，那么在位置尺度图（Scale-Location Graph，左下）中，水平线周围的点应该随机分布。该图似乎满足此假设。

最后一幅“残差与杠杆图”（Residuals vs Leverage，右下）提供了你可能关注的单个观测点

的信息。从图形可以鉴别出离群点、高杠杆值点和强影响点。下面来详细介绍。

- 一个观测点是离群点，表明拟合回归模型对其预测效果不佳（产生了巨大的或正或负的残差）。
- 一个观测点有很高的杠杆值，表明它是一个异常的预测变量值的组合。也就是说，在预测变量空间中，它是一个离群点。因变量值不参与计算一个观测点的杠杆值。
- 一个观测点是强影响点（influential observation），表明它对模型参数的估计产生的影响过大，非常不成比例。强影响点可以通过Cook距离即Cook's D统计量来鉴别。

不过老实说，我觉得残差-杠杆图的可读性差而且不够实用。在接下来的章节中，你将会看到对这一信息更好的呈现方法。

为了章节的完整性，让我们再看看二次拟合的诊断图。代码为：

```
fit2 <- lm(weight ~ height + I(height^2), data=women)
par(mfrow=c(2,2))
plot(fit2)
```

结果见图8-7。

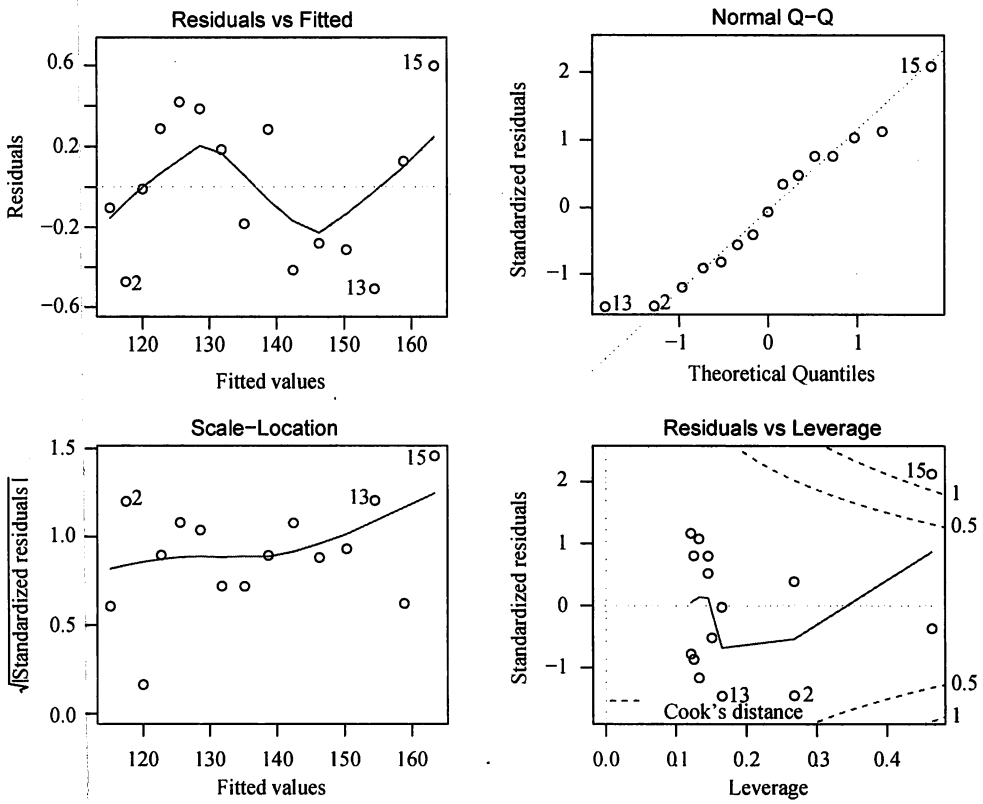


图8-7 体重对身高和身高平方的回归诊断图

这第二组图表明多项式回归拟合效果比较理想，基本符合了线性假设、残差正态性（除了观测点13）和同方差性（残差方差不变）。观测点15看起来像是强影响点（根据是它有较大的Cook距离值），删除它将会影响参数的估计。事实上，删除观测点13和15，模型会拟合得会更好。使用：

```
newfit <- lm(weight~ height + I(height^2), data=women[-c(13,15),])
```

即可拟合剔除点后的模型。但是对于删除数据，要非常小心，因为本应是你的模型去匹配数据，而不是反过来。

最后，我们再应用这个基本的方法，来看看states的多元回归问题。

```
fit <- lm(Murder ~ Population + Illiteracy + Income + Frost, data=states)
par(mfrow=c(2,2))
plot(fit)
```

结果展示在图8-8中。正如从图上看到的，除去Nevada一个离群点，模型假设得到了很好的满足。

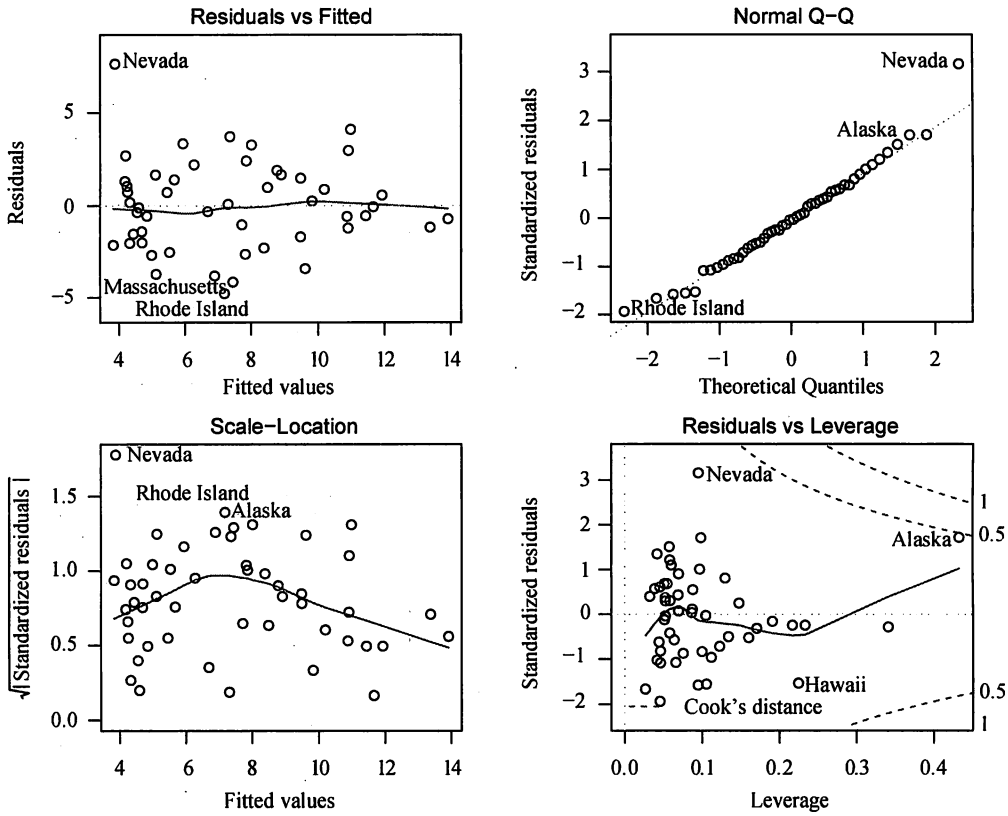


图8-8　谋杀率对州各因素的回归诊断图

虽然这些标准的诊断图形很有用，但是R中还有更好的工具可用，相比plot(*fit*)方法，我更推荐它们。

8.3.2 改进的方法

car包提供了大量函数，大大增强了拟合和评价回归模型的能力（参见表8-4）。

表8-4 （car包中的）回归诊断实用函数

函 数	目 的
qqPlot()	分位数比较图
durbinWatsonTest()	对误差自相关性做Durbin-Watson检验
crPlots()	成分与残差图
ncvTest()	对非恒定的误差方差做得分检验
spreadLevelPlot()	分散水平检验
outlierTest()	Bonferroni离群点检验
avPlots()	添加的变量图形
inluencePlot()	回归影响图
scatterplot()	增强的散点图
scatterplotMatrix()	增强的散点图矩阵
vif()	方差膨胀因子

值得注意的是，car包的2.*x*版本相对1.*x*版本作了许多改变，包括函数的名字和用法。本章基于2.*x*版本。

另外，gvlma包提供了对所有线性模型假设进行检验的方法。作为比较，我们将把它们应用到之前的多元回归例子中。

1. 正态性

与基础包中的plot()函数相比，qqPlot()函数提供了更为精确的正态假设检验方法，它画出了在n-p-1个自由度的t分布下的学生化残差（studentized residual，也称学生化删除残差或折叠化残差）图形，其中n是样本大小，p是回归参数的数目（包括截距项）。代码如下：

```
library(car)
fit <- lm(Murder ~ Population + Illiteracy + Income + Frost, data=states)
qqPlot(fit, labels=row.names(states), id.method="identify",
  simulate=TRUE, main="Q-Q Plot")
```

qqPlot()函数生成的概率图见图8-9。id.method = "identify"选项能够交互式绘图——待图形绘制后，用鼠标单击图形内的点，将会标注函数中label选项的设定值。敲击Esc键，从图形下拉菜单中选择Stop，或者在图形上右击，都将关闭这种交互模式。此处，我已经鉴定出了Nevada异常。当simulate=TRUE时，95%的置信区间将会用参数自助法（自助法可参见第12章）生成。

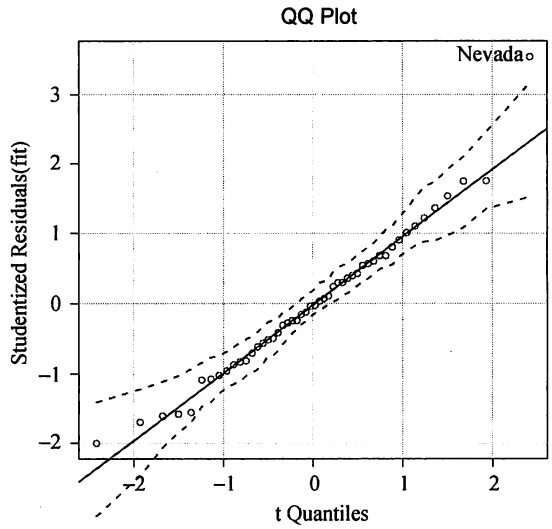


图8-9　学生化残差的Q-Q图

除了Nevada，所有的点都离直线很近，并都落在置信区间内，这表明正态性假设符合得很好。但是你也必须关注下Nevada，它有一个很大的正残差值（真实值–预测值），表明模型低估了该州的谋杀率。特别地：

```
> states["Nevada",]

       Murder Population Illiteracy Income Frost
Nevada   11.5        590        0.5   5149   188

> fitted(fit)["Nevada"]

  Nevada
3.878958

> residuals(fit)["Nevada"]

  Nevada
7.621042

> rstudent(fit)["Nevada"]

  Nevada
3.542929
```

可以看到，Nevada的谋杀率是11.5%，而模型预测的谋杀率为3.9%。

你应该会提出这样的问题："为什么Nevada的谋杀率会比根据人口、收入、文盲率和温度预测所得的谋杀率高呢？"没有看过电影《盗亦有道》（*Goodfellas*）的你愿意猜一猜吗？

可视化误差还有其他方法，比如使用代码清单8-6中的代码。`residplot()`函数生成学生化残差柱状图（即直方图），并添加正态曲线、核密度曲线和轴须图。它不需要加载`car`包。

代码清单8-6 绘制学生化残差图的函数

```
residplot <- function(fit, nbreaks=10) {
              z <- rstudent(fit)
              hist(z, breaks=nbreaks, freq=FALSE,
              xlab="Studentized Residual",
              main="Distribution of Errors")
              rug(jitter(z), col="brown")
              curve(dnorm(x, mean=mean(z), sd=sd(z)),
                    add=TRUE, col="blue", lwd=2)
              lines(density(z)$x, density(z)$y,
                    col="red", lwd=2, lty=2)
              legend("topright",
                    legend = c( "Normal Curve", "Kernel Density Curve"),
                    lty=1:2, col=c("blue","red"), cex=.7)
         }

residplot(fit)
```

结果如图8-10所示。

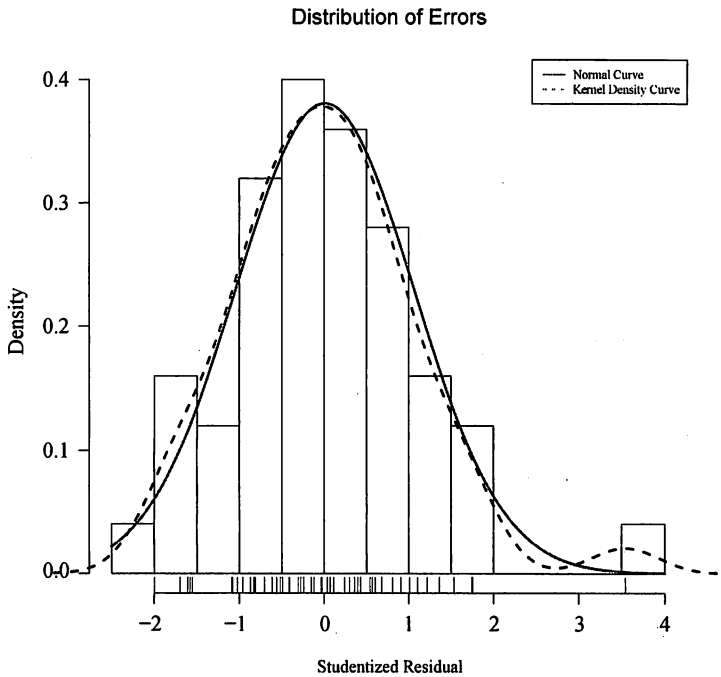


图8-10 用residplot()函数绘制的学生化残差分布图

正如你所看到的，除了一个很明显的离群点，误差很好地服从了正态分布。虽然Q-Q图已经蕴藏了很多信息，但我总觉得从一个柱状图或者密度图测量分布的斜度比使用概率图更容易。因此为何不一起使用这两幅图呢？

2. 误差的独立性

之前章节提过，判断因变量值（或残差）是否相互独立，最好的方法是依据收集数据方式的先验知识。例如，时间序列数据通常呈现自相关性——相隔时间越近的观测相关性大于相隔越远的观测。car包提供了一个可做Durbin-Watson检验的函数，能够检测误差的序列相关性。在多元回归中，使用下面的代码可以做Durbin-Watson检验：

```
> durbinWatsonTest(fit)
 lag Autocorrelation D-W Statistic p-value
   1          -0.201          2.32   0.282
 Alternative hypothesis: rho != 0
```

p值不显著（p=0.282）说明无自相关性，误差项之间独立。滞后项（lag=1）表明数据集中每个数据都是与其后一个数据进行比较的。该检验适用于时间独立的数据，对于非聚集型的数据并不适用。注意，durbinWatsonTest()函数使用自助法（参见第12章）来导出p值，如果添加了选项simulate=FALSE，则每次运行测试时获得的结果都将略有不同。

3. 线性

通过*成分残差图*（component plus residual plot）也称*偏残差图*（partial residual plot），你可以看看因变量与自变量之间是否呈非线性关系，也可以看看是否有不同于已设定线性模型的系统偏差，图形可用car包中的crPlots()函数绘制。

创建变量X_j的成分残差图，需要绘制点$\varepsilon_i + (\hat{\beta}_j * X_{ji})$ vs. X_{ji}。其中残差项ε_i是基于所有模型的，i=1...n。每幅图都会给出$(\hat{\beta}_j * X_{ji})$ vs. X_{ji}的直线。平滑拟合曲线（loess）将在第11章介绍。代码如下：

```
> library(car)
> crPlots(fit)
```

结果如图8-11所示。若图形存在非线性，则说明你可能对预测变量的函数形式建模不够充分，那么就需要添加一些曲线成分，比如多项式项，或对一个或多个变量进行变换（如用log(X)代替X），或用其他回归变体形式而不是线性回归。本章稍后会介绍变量变换。

从图8-11中可以看出，成分残差图证实了你的线性假设，线性模型形式对该数据集看似是合适的。

4. 同方差性

car包提供了两个有用的函数，可以判断误差方差是否恒定。ncvTest()函数生成一个计分检验，零假设为误差方差不变，备择假设为误差方差随着拟合值水平的变化而变化。若检验显著，则说明存在异方差性（误差方差不恒定）。

spreadLevelPlot()函数创建一个添加了最佳拟合曲线的散点图，展示标准化残差绝对值与拟合值的关系。函数应用如代码清单8-7所示。

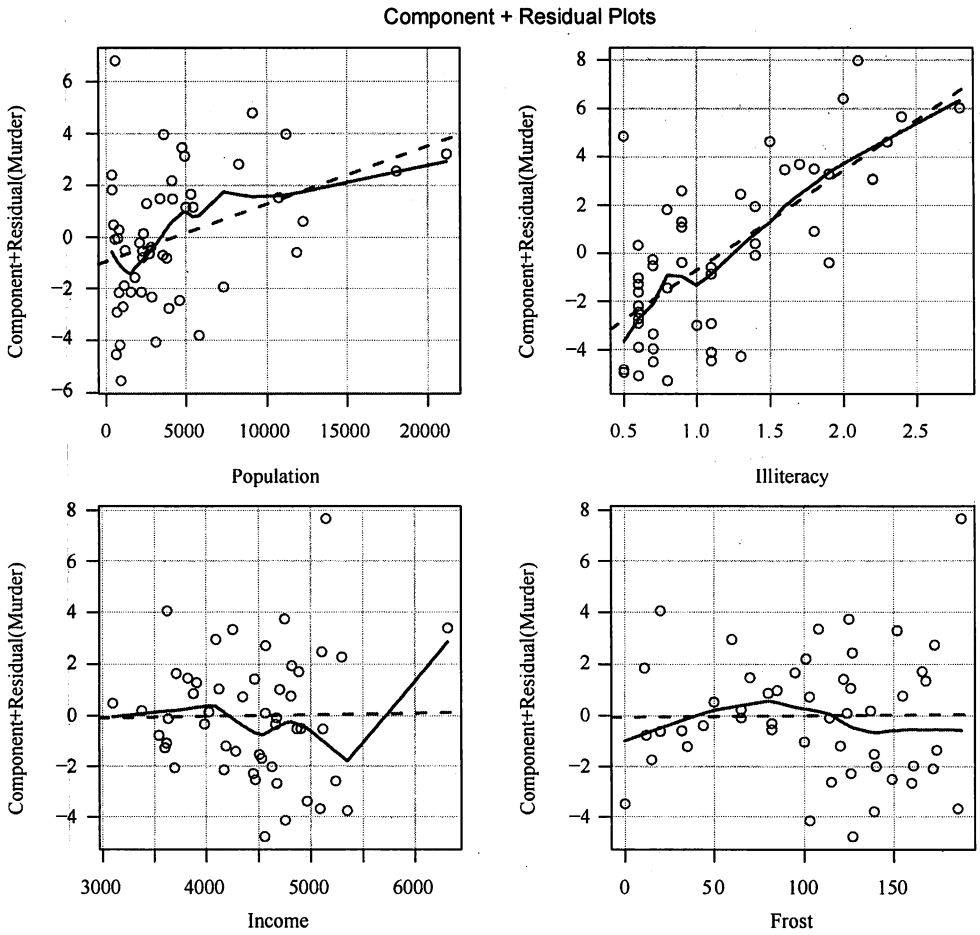


图8-11 谋杀率对州各因素回归的成分残差图

代码清单8-7 检验同方差性

```
> library(car)
> ncvTest(fit)

Non-constant Variance Score Test
Variance formula: ~ fitted.values
Chisquare=1.7    Df=1     p=0.19

> spreadLevelPlot(fit)

Suggested power transformation:  1.2
```

可以看到，计分检验不显著（p=0.19），说明满足方差不变假设。你还可以通过分布水平图（图8-12）看到这一点，其中的点在水平的最佳拟合曲线周围呈水平随机分布。若违反了该假设，

你将会看到一个非水平的曲线。代码结果建议幂次变换（suggested power transformation）的含义是，经过p次幂（Y^p）变换，非恒定的误差方差将会平稳。例如，若图形显示出了非水平趋势，建议幂次转换为0.5，在回归等式中用$\sqrt{Y}$代替Y，可能会使模型满足同方差性。若建议幂次为0，则使用对数变换。对于当前例子，异方差性很不明显，因此建议幂次接近1（不需要进行变换）。

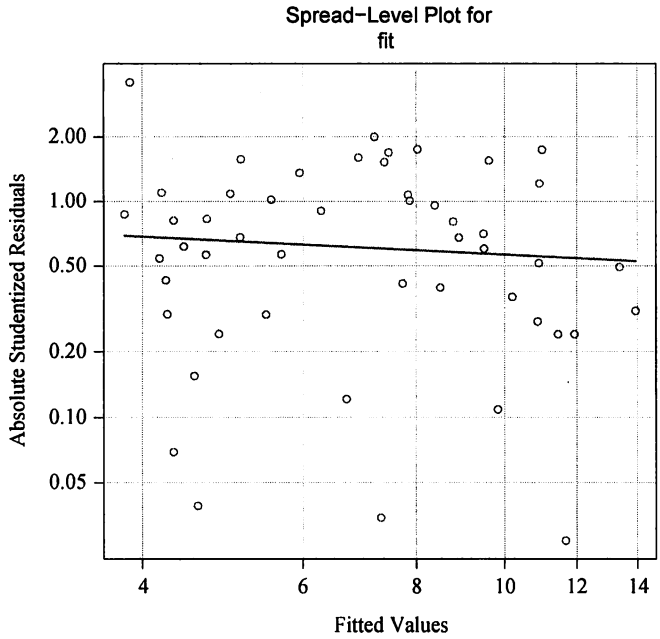


图8-12　评估不变方差的分布水平图

8.3.3　线性模型假设的综合验证

最后，让我一起学习下gvlma包中的gvlma()函数。gvlma()函数由Pena和Slate（2006）编写，能对线性模型假设进行综合验证，同时还能做偏斜度、峰度和异方差性的评价。换句话说，它给模型假设提供了一个单独的综合检验（通过/不通过）。代码清单8-8仍是对states数据的检验。

代码清单8-8　线性模型假设的综合检验

```
> library(gvlma)
> gvmodel <- gvlma(fit)
> summary(gvmodel)

ASSESSMENT OF THE LINEAR MODEL ASSUMPTIONS
USING THE GLOBAL TEST ON 4 DEGREES-OF-FREEDOM:
Level of Significance= 0.05
```

```
Call:
 gvlma(x=fit)

                    Value p-value                Decision
Global Stat         2.773   0.597 Assumptions acceptable.
Skewness            1.537   0.215 Assumptions acceptable.
Kurtosis            0.638   0.425 Assumptions acceptable.
Link Function       0.115   0.734 Assumptions acceptable.
Heteroscedasticity 0.482   0.487 Assumptions acceptable.
```

从输出项（Global Stat中的文字栏）我们可以看到数据满足OLS回归模型所有的统计假设（p=0.597）。若Decision下的文字表明违反了假设条件（比如p<0.05），你可以使用前几节讨论的方法来判断哪些假设没有被满足。

8.3.4 多重共线性

在即将结束回归诊断这一节前，让我们来看一个比较重要的问题，它与统计假设没有直接关联，但是对于解释多元回归的结果非常重要。

假设你正在进行一项握力研究，自变量包括DOB（Date Of Birth，出生日期）和年龄。你用握力对DOB和年龄进行回归，F检验显著，p<0.001。但是当你观察DOB和年龄的回归系数时，却发现它们都不显著（也就是说无法证明它们与握力相关）。到底发生了什么呢？

原因是DOB与年龄在四舍五入后相关性极大。回归系数测量的是当其他预测变量不变时，某个预测变量对响应变量的影响。那么此处就相当于假定年龄不变，然后测量握力与年龄的关系，这种问题就称作多重共线性（multicollinearity）。它会导致模型参数的置信区间过大，使单个系数解释起来很困难。

多重共线性可用统计量VIF（Variance Inflation Factor，方差膨胀因子）进行检测。VIF的平方根表示变量回归参数的置信区间能膨胀为与模型无关的预测变量的程度（因此而得名）。car包中的vif()函数提供VIF值。一般原则下，$\sqrt{vif}$ >2就表明存在多重共线性问题。代码参见代码清单8-9，结果表明预测变量不存在多重共线性问题。

代码清单8-9 检测多重共线性

```
>library(car)
> vif(fit)

Population Illiteracy     Income      Frost
       1.2        2.2        1.3        2.1

> sqrt(vif(fit)) > 2 # problem?
Population Illiteracy     Income      Frost
     FALSE      FALSE      FALSE      FALSE
```

8.4 异常观测值

一个全面的回归分析要覆盖对异常值的分析，包括离群点、高杠杆值点和强影响点。这些数

据点需要更深入的研究，因为它们在一定程度上与其他观测点不同，可能对结果产生较大的负面影响。下面我们依次学习这些异常值。

8.4.1　离群点

离群点是指那些模型预测效果不佳的观测点。它们通常有很大的、或正或负的残差（$Y_i-\hat{Y}_i$）。正的残差说明模型低估了响应值，负的残差则说明高估了响应值。

你已经学习过一种鉴别离群点的方法：图8-9的Q-Q图，落在置信区间带外的点即可被认为是离群点。另外一个粗糙的判断准则：标准化残差值大于2或者小于–2的点可能是离群点，需要特别关注。

car包也提供了一种离群点的统计检验方法。outlierTest()函数可以求得最大标准化残差绝对值Bonferroni调整后的p值：

```
> library(car)
> outlierTest(fit)

       rstudent unadjusted p-value Bonferonni p
Nevada      3.5            0.00095        0.048
```

此处，你可以看到Nevada被判定为离群点（p=0.048）。注意，该函数只是根据单个最大（或正或负）残差值的显著性来判断是否有离群点。若不显著，则说明数据集中没有离群点；若显著，则你必须删除该离群点，然后再检验是否还有其他离群点存在。

8.4.2　高杠杆值点

高杠杆值观测点，即是与其他预测变量有关的离群点。换句话说，它们是由许多异常的预测变量值组合起来的，与响应变量值没有关系。

高杠杆值的观测点可通过帽子统计量（hat statistic）判断。对于一个给定的数据集，帽子均值为p/n，其中p 是模型估计的参数数目（包含截距项），n 是样本量。一般来说，若观测点的帽子值大于帽子均值的2或3倍，即可以认定为高杠杆值点。下面代码画出了帽子值的分布：

```
hat.plot <- function(fit) {
              p <- length(coefficients(fit))
              n <- length(fitted(fit))
              plot(hatvalues(fit), main="Index Plot of Hat Values")
              abline(h=c(2,3)*p/n, col="red", lty=2)
              identify(1:n, hatvalues(fit), names(hatvalues(fit)))
            }
hat.plot(fit)
```

结果见图8-13。

水平线标注的即帽子均值2倍和3倍的位置。定位函数（locator function）能以交互模式绘图：单击感兴趣的点，然后进行标注，停止交互时，用户可按Esc键退出，或从图形下拉菜单中选择Stop，或直接右击图形。此图中，可以看到Alaska和California非常异常，查看它们的预测变量值，与其他48个州进行比较发现：Alaska收入比其他州高得多，而人口和温度却很低；California人口

比其他州府多得多，但收入和温度也很高。

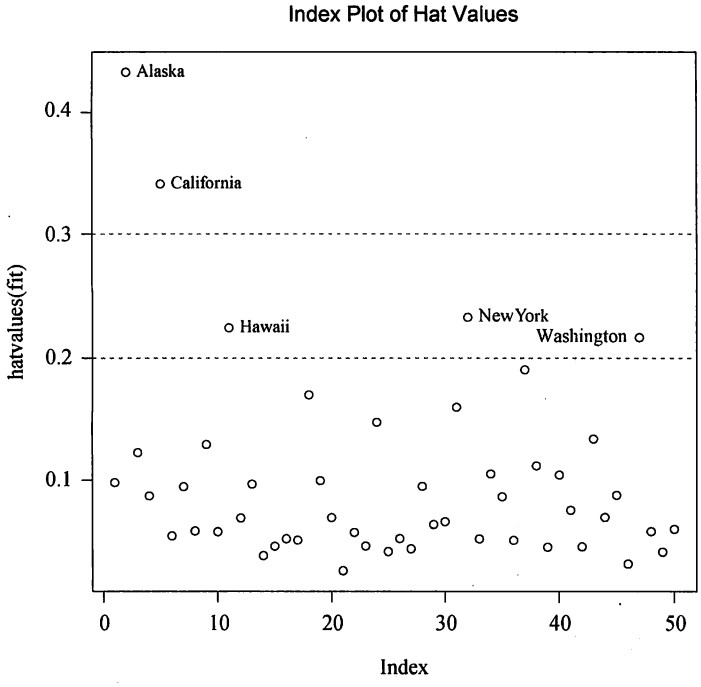


图8-13 用帽子值来判定高杠杆值点

高杠杆值点可能会是强影响点，也可能不是，这要看它们是否是离群点。

8.4.3 强影响点

强影响点，即对模型参数估计值影响有些比例失衡的点。例如，若移除模型的一个观测点时模型会发生巨大的改变，那么你就需要检测一下数据中是否存在强影响点了。

有两种方法可以检测强影响点：Cook距离，或称D统计量，以及变量添加图（added variable plot）。一般来说，Cook's D值大于$4/(n-k-1)$，则表明它是强影响点，其中n为样本量大小，k是预测变量数目。可通过如下代码绘制Cook's D图形（图8-14）：

```
cutoff <- 4/(nrow(states)-length(fit$coefficients)-2)
plot(fit, which=4, cook.levels=cutoff)
abline(h=cutoff, lty=2, col="red")
```

通过图形可以判断Alaska、Hawaii和Nevada是强影响点。若删除这些点，将会导致回归模型截距项和斜率发生显著变化。注意，虽然该图对搜寻强影响点很有用，但我逐渐发现以1为分割点比$4/(n-k-1)$更具一般性。若设定D=1为判别标准，则数据集中没有点看起来像是强影响点。

Cook's D图有助于鉴别强影响点，但是并不提供关于这些点如何影响模型的信息。变量添加图弥补了这个缺陷。对于一个响应变量和k个预测变量，你可以如下图创建k个变量添加图。

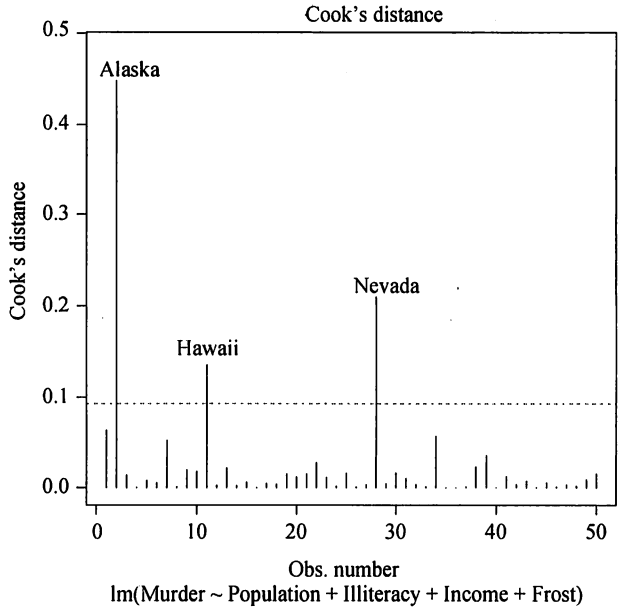


图8-14　鉴别强影响点的Cook's D图

所谓变量添加图，即对于每个预测变量X_k，绘制X_k在其他$k-1$个预测变量上回归的残差值相对于响应变量在其他$k-1$个预测变量上回归的残差值的关系图。car包中的avPlots()函数可提供变量添加图：

```
library(car)
avPlots(fit, ask=FALSE, onepage=TRUE, id.method="identify")
```

结果如图8-15所示。图形一次生成一个，用户可以通过单击点来判断强影响点。按下Esc，或从图形菜单中选择Stop，或右击，便可移动到下一个图形。我已在左下图中鉴别出Alaska为强影响点。

图中的直线表示相应预测变量的实际回归系数。你可以想象删除某些强影响点后直线的改变，以此来估计它的影响效果。例如，来看左下角的图（“Murder|others” VS “Income|others”），若删除点Alaska，直线将往负向移动。事实上，删除Alaska，Income的回归系数将会从0.000 06变为–0.000 85。

当然，利用car包中的influencePlot()函数，你还可以将离群点、杠杆值和强影响点的信息整合到一幅图形中：

```
library(car)
influencePlot(fit, id.method="identify", main="Influence Plot",
              sub="Circle size is proportional to Cook's distance")
```

图8-16反映出Nevada和Rhode Island是离群点，New York、California、Hawaii和Washington有高杠杆值，Nevada、Alaska和Hawaii为强影响点。

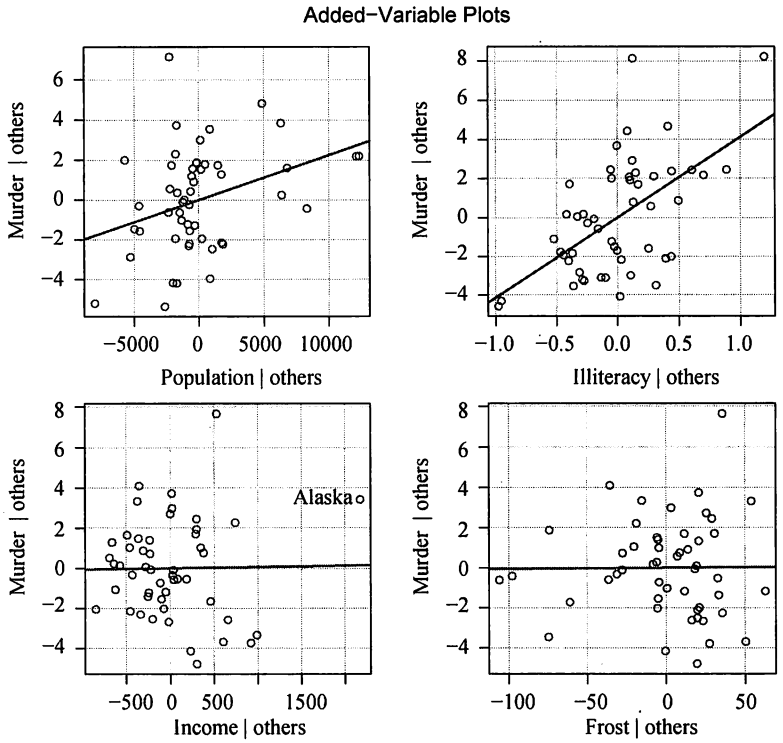


图8-15 评估强影响点影响效果的变量添加图

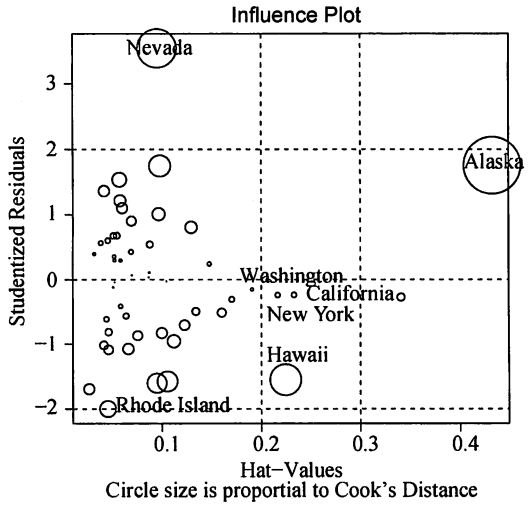


图8-16 影响图。纵坐标超过+2或小于-2的州可被认为是离群点，水平轴超过0.2或0.3的州有高杠杆值（通常为预测值的组合）。圆圈大小与影响成比例，圆圈很大的点可能是对模型参数的估计造成的不成比例影响的强影响点

8.5 改进措施

我们已经花费了不少篇幅来学习回归诊断，你可能会问："如果发现了问题，那么能做些什么呢？"有四种方法可以处理违背回归假设的问题：

- 删除观测点；
- 变量变换；
- 添加或删除变量；
- 使用其他回归方法。

下面让我们依次学习。

8.5.1 删除观测点

删除离群点通常可以提高数据集对于正态假设的拟合度，而强影响点会干扰结果，通常也会被删除。删除最大的离群点或者强影响点后，模型需要重新拟合。若离群点或强影响点仍然存在，重复以上过程直至获得比较满意的拟合。

不过，我对删除观测点持谨慎态度。若是因为数据记录错误，或是没有遵守规程，或是受试对象误解了指导说明，这种情况下的点可以判断为离群点，删除它们是十分合理的。

不过在其他情况下，所收集数据中的异常点可能是最有趣的东西。发掘为何该观测点不同于其他点，有助于你更深刻地理解研究的主题，或者发现其他你可能没有想过的问题。我们一些最伟大的进步正是源自于意外地发现了那些不符合我们先验认知的东西（抱歉，我说得夸张了）。

8.5.2 变量变换

当模型不符合正态性、线性或者同方差性假设时，一个或多个变量的变换通常可以改善或调整模型效果。变换多用Y^{λ}替代Y，λ的常见值和解释见表8-5。

表8-5　常见的变换

	−2	−1	−0.5	0	0.5	1	2
变换	$1/Y^2$	$1/Y$	$1/\sqrt{Y}$	$\log(Y)$	$\sqrt{Y}$	无	Y^2

若Y是比例数，通常使用logit变换[$\ln(Y/1-Y)$]。

当模型违反了正态假设时，通常可以对响应变量尝试某种变换。car包中的`powerTransform()`函数通过λ的最大似然估计来正态化变量X^{λ}。代码清单8-10是对数据`states`的应用。

代码清单8-10　Box-Cox正态变换

```
> library(car)
> summary(powerTransform(states$Murder))

bcPower Transformation to Normality
```

```
                Est.Power Std.Err. Wald Lower Bound Wald Upper Bound
states$Murder       0.6     0.26            0.088              1.1

Likelihood ratio tests about transformation parameters
                      LRT df  pval
LR test, lambda=(0) 5.7  1 0.017
LR test, lambda=(1) 2.1  1 0.145
```

结果表明，你可以用$Murder^{0.6}$来正态化变量Murder。由于0.6很接近0.5，你可以尝试用平方根变换来提高模型正态性的符合程度。但在本例中，λ= 1的假设也无法拒绝（p=0.145），因此没有强有力的证据表明本例需要变量变换，这与图8-9的Q-Q图结果一致。

当违反了线性假设时，对预测变量进行变换常常会比较有用。car包中的boxTidwell()函数通过获得预测变量幂数的最大似然估计来改善线性关系。下面的例子为用州的人口和文盲率来预测谋杀率，对模型进行了Box-Tidwell变换：

```
> library(car)
> boxTidwell(Murder~Population+Illiteracy,data=states)

            Score Statistic p-value MLE of lambda
Population           -0.32    0.75          0.87
Illiteracy            0.62    0.54          1.36
```

结果显示，使用变换$Population^{0.87}$和$Illiteracy^{1.36}$能够大大改善线性关系。但是对Population（p=0.75）和Illiteracy（p=0.54）的计分检验又表明变量并不需要变换。这些结果与图8-11的成分残差图是一致的。

响应变量变换还能改善异方差性（误差方差非恒定）。在代码清单8-7中，你可以看到car包中spreadLevelPlot()函数提供的幂次变换应用，不过，states例子满足了方差不变性，不需要进行变量变换。

谨慎对待变量变换

统计学中流传着一个很老的笑话：如果你不能证明A，那就证明B，假装它就是A。（对于统计学家来说，这很滑稽好笑。）此处引申的意思是，如果你变换了变量，你的解释必须基于变换后的变量，而不是初始变量。如果变换得有意义，比如收入的对数变换、距离的逆变换，解释起来就会容易得多。但是若变换得没有意义，你就应该避免这样做。比如，你怎样解释自杀意念的频率与抑郁程度的立方根间的关系呢？

8.5.3 增删变量

改变模型的变量将会影响模型的拟合度。有时，添加一个重要变量可以解决我们已经讨论过的许多问题，删除一个冗余变量也能达到同样的效果。

删除变量在处理多重共线性时是一种非常重要的方法。如果你仅仅是做预测，那么多重共线性并不构成问题，但是如果还要对每个预测变量进行解释，那么就必须解决这个问题。最常见的方法就是删除某个存在多重共线性的变量（某个变量$\sqrt{\text{vif}} > 2$）。另外一个可用的方法便是岭回

归——多元回归的变体，专门用来处理多重共线性问题。

8.5.4　尝试其他方法

正如刚才提到的，处理多重共线性的一种方法是拟合一种不同类型的模型（本例中是岭回归）。其实，如果存在离群点和/或强影响点，可以使用稳健回归模型替代OLS回归。如果违背了正态性假设，可以使用非参数回归模型。如果存在显著的非线性，能尝试非线性回归模型。如果违背了误差独立性假设，还能用那些专门研究误差结构的模型，比如时间序列模型或者多层次回归模型。最后，你还能转向广泛应用的广义线性模型，它能适用于许多OLS回归假设不成立的情况。

在第13章中，我们将会介绍其中一些方法。至于什么时候需要提高OLS回归拟合度，什么时候需要换一种方法，这些判断是很复杂的，需要依靠你对主题知识的理解，判断出哪个模型提供最佳结果。

既然提到最佳结果，现在我们就先讨论一下回归模型中的预测变量选择问题。

8.6　选择“最佳”的回归模型

尝试获取一个回归方程时，实际上你就面对着从众多可能的模型中做选择的问题。是不是所有的变量都要包括？抑或去掉那个对预测贡献不显著的变量？还是需要添加多项式项和/或交互项来提高拟合度？最终回归模型的选择总是会涉及预测精度（模型尽可能地拟合数据）与模型简洁度（一个简单且能复制的模型）的调和问题。如果有两个几乎相同预测精度的模型，你肯定喜欢简单的那个。本节讨论的问题，就是如何在候选模型中进行筛选。注意，“最佳”是打了引号的，因为没有做评价的唯一标准，最终的决定需要调查者的评判。（把它看做工作保障吧。）

8.6.1　模型比较

用基础安装中的anova()函数可以比较两个嵌套模型的拟合优度。所谓嵌套模型，即它的一些项完全包含在另一个模型中。在states的多元回归模型中，我们发现Income和Frost的回归系数不显著，此时你可以检验不含这两个变量的模型与包含这两项的模型预测效果是否一样好（见代码清单8-11）。

代码清单8-11　用anova()函数比较

```
> fit1 <- lm(Murder ~ Population + Illiteracy + Income + Frost,
           data=states)
> fit2 <- lm(Murder ~ Population + Illiteracy, data=states)
> anova(fit2, fit1)

Analysis of Variance Table

Model 1: Murder ~ Population + Illiteracy
```

```
Model 2: Murder ~ Population + Illiteracy + Income + Frost
  Res.Df     RSS  Df     Sum of Sq      F Pr(>F)
1     47 289.246
2     45 289.167  2     0.079 0.0061     0.994
```

此处，模型1嵌套在模型2中。anova()函数同时还对是否应该添加Income和Frost到线性模型中进行了检验。由于检验不显著（p=0.994），因此我们可以得出结论：不需要将这两个变量添加到线性模型中，可以将它们从模型中删除。

AIC（Akaike Information Criterion，赤池信息准则）也可以用来比较模型，它考虑了模型的统计拟合度以及用来拟合的参数数目。AIC值越小的模型要优先选择，它说明模型用较少的参数获得了足够的拟合度。该准则可用AIC()函数实现（见代码清单8-12）。

代码清单8-12 用AIC来比较模型

```
> fit1 <- lm(Murder ~ Population + Illiteracy + Income + Frost,
           data=states)
> fit2 <- lm(Murder ~ Population + Illiteracy, data=states)
> AIC(fit1,fit2)

     df      AIC
fit1  6 241.6429
fit2  4 237.6565
```

此处AIC值表明没有Income和Frost的模型更佳。注意，ANOVA需要嵌套模型，而AIC方法不需要。

比较两模型相对来说更为直接，但如果有4个、10个，或者100个可能的模型怎么办呢？这便是下节的主题。

8.6.2 变量选择

从大量候选变量中选择最终的预测变量有以下两种流行的方法：逐步回归法（stepwise method）和全子集回归（all-subsets regression）。

1. 逐步回归

逐步回归中，模型会一次添加或者删除一个变量，直到达到某个判停准则为止。例如，向前逐步回归（forward stepwise）每次添加一个预测变量到模型中，直到添加变量不会使模型有所改进为止。向后逐步回归（backward stepwise）从模型包含所有预测变量开始，一次删除一个变量直到会降低模型质量为止。而向前向后逐步回归（stepwise stepwise，通常称作逐步回归，以避免听起来太冗长），结合了向前逐步回归和向后逐步回归的方法，变量每次进入一个，但是每一步中，变量都会被重新评价，对模型没有贡献的变量将会被删除，预测变量可能会被添加、删除好几次，直到获得最优模型为止。

逐步回归法的实现依据增删变量的准则不同而不同。MASS包中的stepAIC()函数可以实现逐步回归模型（向前、向后和向前向后），依据的是精确AIC准则。代码清单8-13中，我们应用的是向后回归。

代码清单8-13　向后回归

```
> library(MASS)
> fit1 <- lm(Murder ~ Population + Illiteracy + Income + Frost,
           data=states)
> stepAIC(fit, direction="backward")

Start:  AIC=97.75
Murder ~ Population + Illiteracy + Income + Frost

             Df Sum of Sq    RSS    AIC
- Frost       1      0.02 289.19  95.75
- Income      1      0.06 289.22  95.76
<none>                    289.17  97.75
- Population  1     39.24 328.41 102.11
- Illiteracy  1    144.26 433.43 115.99

Step:  AIC=95.75
Murder ~ Population + Illiteracy + Income

             Df Sum of Sq    RSS    AIC
- Income      1      0.06 289.25  93.76
<none>                    289.19  95.75
- Population  1     43.66 332.85 100.78
- Illiteracy  1    236.20 525.38 123.61

Step:  AIC=93.76
Murder ~ Population + Illiteracy

             Df Sum of Sq    RSS    AIC
<none>                    289.25  93.76
- Population  1     48.52 337.76  99.52
- Illiteracy  1    299.65 588.89 127.31

Call:
lm(formula=Murder ~ Population + Illiteracy, data=states)

Coefficients:
(Intercept)   Population   Illiteracy
  1.6515497    0.0002242    4.0807366
```

开始时模型包含4个（全部）预测变量，然后每一步中，AIC列提供了删除一个行中变量后模型的AIC值，<none>中的AIC值表示没有变量被删除时模型的AIC。第一步，Frost被删除，AIC从97.75降低到95.75；第二步，Income被删除，AIC继续下降，成为93.76，然后再删除变量将会增加AIC，因此终止选择过程。

逐步回归法其实存在争议，虽然它可能会找到一个好的模型，但是不能保证模型就是最佳模型，因为不是每一个可能的模型都被评价了。为克服这个限制，便有了全子集回归法。

2. 全子集回归

全子集回归，顾名思义，即所有可能的模型都会被检验。分析员可以选择展示所有可能的结果，也可以展示n个不同子集大小（一个、两个或多个预测变量）的最佳模型。例如，若nbest=2，

先展示两个最佳的单预测变量模型，然后展示两个最佳的双预测变量模型，以此类推，直到包含所有的预测变量。

全子集回归可用leaps包中的regsubsets()函数实现。你能通过R平方、调整R平方或Mallows Cp统计量等准则来选择“最佳”模型。

R平方含义是预测变量解释响应变量的程度；调整R平方与之类似，但考虑了模型的参数数目。R平方总会随着变量数目的增加而增加。当与样本量相比，预测变量数目很大时，容易导致过拟合。R平方很可能会丢失数据的偶然变异信息，而调整R平方则提供了更为真实的R平方估计。另外，Mallows Cp统计量也用来作为逐步回归的判停规则。广泛研究表明，对于一个好的模型，它的Cp统计量非常接近于模型的参数数目（包括截距项）。

在代码清单8-14中，我们对states数据进行了全子集回归。结果可用leaps包中的plot()函数绘制（如图8-17所示），或者用car包中的subsets()函数绘制（如图8-18所示）。

代码清单8-14 全子集回归

```
library(leaps)
leaps <-regsubsets(Murder ~ Population + Illiteracy + Income +
  Frost, data=states, nbest=4)
plot(leaps, scale="adjr2")

library(car)
subsets(leaps, statistic="cp",
  main="Cp Plot for All Subsets Regression")
abline(1,1,lty=2,col="red")
```

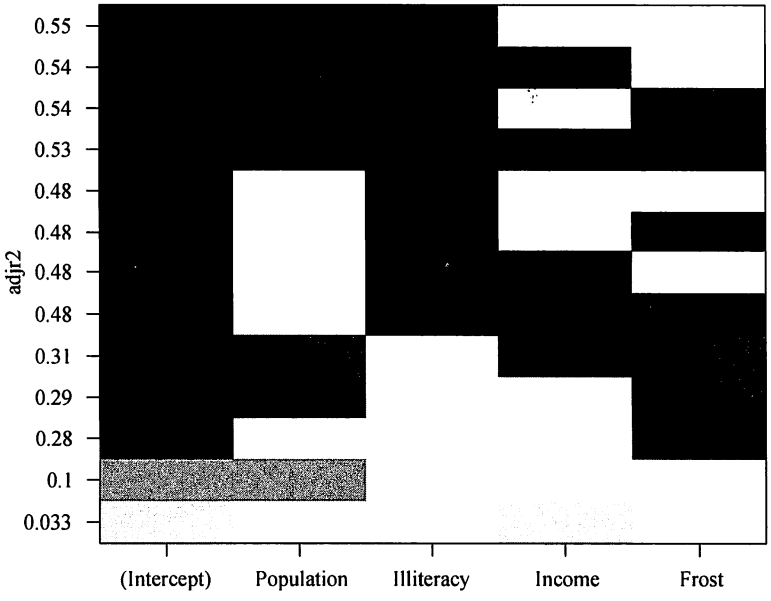


图8-17 基于调整R平方，不同子集大小的四个最佳模型

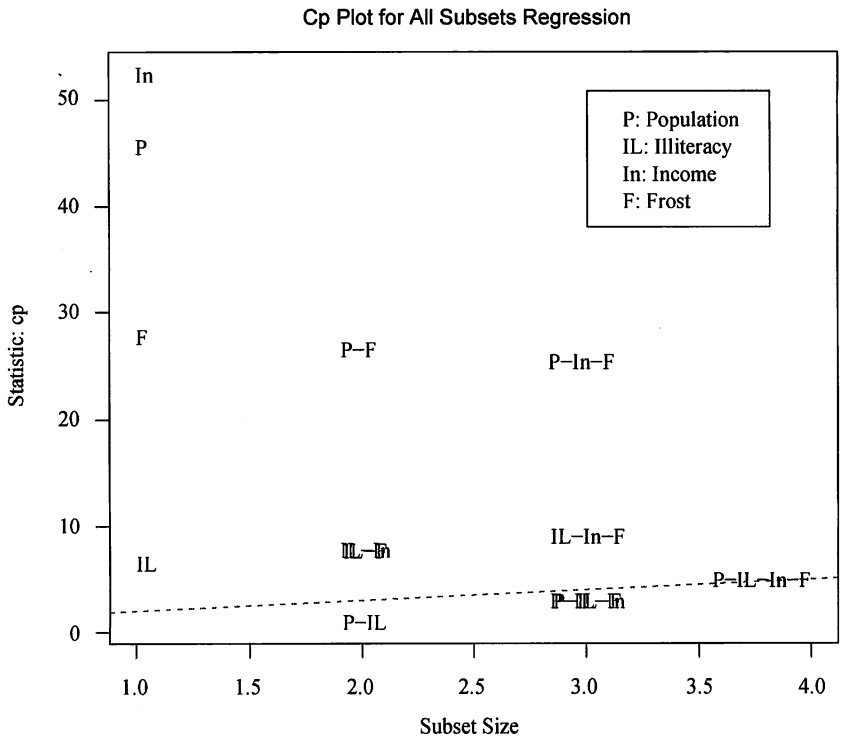


图8-18　基于Mallows Cp统计量，不同子集大小的四个最佳模型

初看图8-17可能比较费解。第一行中（图底部开始），可以看到含intercept（截距项）和Income的模型调整R平方为0.33，含intercept和Population的模型调整R平方为0.1。跳至第12行，你会看到含intercept、Population、Illiteracy和Income的模型调整R平方值为0.54，而仅含intercept、Population和Illiteracy的模型调整R平方为0.55。此处，你会发现含预测变量越少的模型调整R平方越大（对于非调整的R平方，这是不可能的）。图形表明，双预测变量模型（Population和Illiteracy）是最佳模型。

在图8-18中，你会看到对于不同子集大小，基于Mallows Cp统计量的四个最佳模型。越好的模型离截距项和斜率均为1的直线越近。图形表明，你可以选择这几个模型，其余可能的模型都可以不予考虑：含Population和Illiteracy的双变量模型；含Population、Illiteracy和Frost的三变量模型，或Population、Illiteracy和Income的三变量模型（它们在图形上重叠了，不易分辨）；含Population、Illiteracy、Income和Frost的四变量模型。

大部分情况中，全子集回归要优于逐步回归，因为考虑了更多模型。但是，当有大量预测变量时，全子集回归会很慢。一般来说，变量自动选择应该被看做是对模型选择的一种辅助方法，而不是直接方法。拟合效果佳而没有意义的模型对你毫无帮助，主题背景知识的理解才能最终指引你获得理想的模型。

8.7 深层次分析

让我们来结束本章对于回归模型的讨论，介绍评价模型泛化能力和变量相对重要性的方法。

8.7.1 交叉验证

上一节我们学习了为回归方程选择变量的方法。若你最初的目标只是描述性分析，那么只需要做回归模型的选择和解释。但当目标是预测时，你肯定会问："这个方程在真实世界中表现如何呢？"提这样的问题本也是无可厚非的。

从定义来看，回归方法本就是用来从一堆数据中获取最优模型参数。对于OLS回归，通过使得预测误差（残差）平方和最小和对响应变量的解释度（R平方）最大，可获得模型参数。由于等式只是最优化已给出的数据，所以在新数据集上表现并不一定好。

在本章开始，我们讨论了一个例子，生理学家想通过个体锻炼的时间和强度、年龄、性别与BMI来预测消耗的卡路里数。如果用OLS回归方程来拟合该数据，那么仅仅是对一个特殊的观测集最大化R平方，但是研究员想用该等式预测一般个体消耗的卡路里数，而不是原始数据。你知道该等式对于新观测样本表现并不一定好，但是预测的损失会是多少呢？你可能并不知道。通过交叉验证法，我们便可以评价回归方程的泛化能力。

所谓交叉验证，即将一定比例的数据挑选出来作为训练样本，另外的样本作保留样本，先在训练样本上获取回归方程，然后在保留样本上做预测。由于保留样本不涉及模型参数的选择，该样本可获得比新数据更为精确的估计。

在k重交叉验证中，样本被分为k个子样本，轮流将k–1个子样本组合作为训练集，另外1个子样本作为保留集。这样会获得k个预测方程，记录k个保留样本的预测表现结果，然后求其平均值。[当n是观测总数目，k为n时，该方法又称作刀切法（jackknifing）。]

bootstrap包中的crossval()函数可以实现k重交叉验证。在代码清单8-15中，shrinkage()函数对模型的R平方统计量做了k重交叉验证。

代码清单8-15 R平方的k重交叉验证

```
shrinkage <- function(fit, k=10){
  require(bootstrap)

  theta.fit <- function(x,y){lsfit(x,y)}
  theta.predict <- function(fit,x){cbind(1,x)%*%fit$coef}

  x <- fit$model[,2:ncol(fit$model)]
  y <- fit$model[,1]

  results <- crossval(x, y, theta.fit, theta.predict, ngroup=k)
  r2 <- cor(y, fit$fitted.values)^2
  r2cv <- cor(y, results$cv.fit)^2
  cat("Original R-square =", r2, "\n")
  cat(k, "Fold Cross-Validated R-square =", r2cv, "\n")
```

```
  cat("Change =", r2-r2cv, "\n")
  }
```

代码清单8-15中定义了shrinkage()函数，创建了一个包含预测变量和预测值的矩阵，可获得初始R平方以及交叉验证的R平方。（第12章会更详细地讨论自助法。）

对states数据所有预测变量进行回归，然后再用shrinkage()函数做10重交叉验证：

```
> fit <- lm(Murder ~ Population + Income + Illiteracy + Frost, data=states)
> shrinkage(fit)

Original R-square=0.567
10 Fold Cross-Validated R-square=0.4481
Change=0.1188
```

可以看到，基于初始样本的R平方（0.567）过于乐观了。对新数据更好的方差解释率估计是交叉验证后的R平方（0.448）。（注意，观测被随机分配到k个群组中，因此每次运行shrinkage()函数，得到的结果都会有少许不同。）

通过选择有更好泛化能力的模型，还可以用交叉验证来挑选变量。例如，含两个预测变量（Population和Illiteracy）的模型，比全变量模型R平方减少得更少（0.03 VS 0.12）：

```
> fit2 <- lm(Murder~Population+Illiteracy,data=states)
> shrinkage(fit2)

Original R-square=0.5668327
10 Fold Cross-Validated R-square=0.5346871
Change=0.03214554
```

这使得双预测变量模型显得更有吸引力。

其他情况类似，基于大训练样本的回归模型和更接近于感兴趣分布的回归模型，其交叉验证效果更好。R平方减少得越少，预测则越精确。

8.7.2　相对重要性

本章我们一直都有一个疑问："哪些变量对预测有用呢？"但你内心真正感兴趣的其实是："哪些变量对预测*最为重要*？"潜台词就是想根据相对重要性对预测变量进行排序。这个问题很有实际用处。例如，假设你能对团队组织成功所需的领导特质依据相对重要性进行排序，那么就可以帮助管理者关注他们最需要改进的行为。

若预测变量不相关，过程就相对简单得多，你可以根据预测变量与响应变量的相关系数来进行排序。但大部分情况中，预测变量之间有一定相关性，这就使得评价变得复杂很多。

评价预测变量相对重要性的方法一直在涌现。最简单的莫过于比较标准化的回归系数，它表示当其他预测变量不变时，该预测变量一个标准差的变化可引起的响应变量的预期变化（以标准差单位度量）。在进行回归分析前，可用scale()函数将数据标准化为均值为0、标准差为1的数据集，这样用R回归即可获得标准化的回归系数。（注意，scale()函数返回的是一个矩阵，而lm()函数要求一个数据框，你需要用一个中间步骤来转换一下。）代码和多元回归的结果如下：

```
> zstates <- as.data.frame(scale(states))
> zfit <- lm(Murder~Population + Income + Illiteracy + Frost, data=zstates)
> coef(zfit)

(Intercept)  Population      Income  Illiteracy       Frost
 -9.406e-17   2.705e-01   1.072e-02   6.840e-01   8.185e-03
```

此处可以看到，当其他因素不变时，文盲率一个标准差的变化将增加0.68个标准差的谋杀率。根据标准化的回归系数，我们可认为Illiteracy是最重要的预测变量，而Frost是最不重要的。

还有许多其他方法可定量分析相对重要性。比如，可以将相对重要性看做是每个预测变量（本身或与其他预测变量组合）对R平方的贡献。Ulrike Grömping写的`relaimpo`包涵盖了一些相对重要性的评价方法（http://prof.beuth-hochschule.de/groemping/relaimpo/）。

相对权重（relative weight）是一种比较有前景的新方法，它是对所有可能子模型添加一个预测变量引起的R平方平均增加量的一个近似值（Johnson，2004；Johnson，Lebreton，2004；LeBreton，Tonidandel，2008）。代码清单8-16提供了一个生成相对权重的函数。

代码清单8-16 `relweights()`函数，计算预测变量的相对权重

```
relweights <- function(fit,...){
  R <- cor(fit$model)
  nvar <- ncol(R)
  rxx <- R[2:nvar, 2:nvar]
  rxy <- R[2:nvar, 1]
  svd <- eigen(rxx)
  evec <- svd$vectors
  ev <- svd$values
  delta <- diag(sqrt(ev))
  lambda <- evec %*% delta %*% t(evec)
  lambdasq <- lambda ^ 2
  beta <- solve(lambda) %*% rxy
  rsquare <- colSums(beta ^ 2)
  rawwgt <- lambdasq %*% beta ^ 2
  import <- (rawwgt / rsquare) * 100
  lbls <- names(fit$model[2:nvar])
  rownames(import) <- lbls
  colnames(import) <- "Weights"
  barplot(t(import),names.arg=lbls,
     ylab="% of R-Square",
     xlab="Predictor Variables",
     main="Relative Importance of Predictor Variables",
     sub=paste("R-Square=", round(rsquare, digits=3)),
     ...)
return(import)
}
```

注意 代码清单8-16中的代码改编自Johnson博士提供的SPSS程序。可以参考Johnson（2000，*Multivariate Behavioral Research*，35，1－19）了解如何推导相对权重。

现将代码清单8-17中的`relweights()`函数应用到`states`数据集。

代码清单8-17　relweights()函数的应用

```
> fit <- lm(Murder ~ Population + Illiteracy + Income + Frost, data=states)
> relweights(fit, col="lightgrey")

           Weights
Population   14.72
Illiteracy   59.00
Income        5.49
Frost        20.79
```

通过图8-19可以看到各个预测变量对模型方差的解释程度（R平方=0.567），Illiteracy解释了59%的R平方，Frost解释了20.79%。根据相对权重法，Illiteracy有最大的相对重要性，余下依次是Frost、Population和Income。

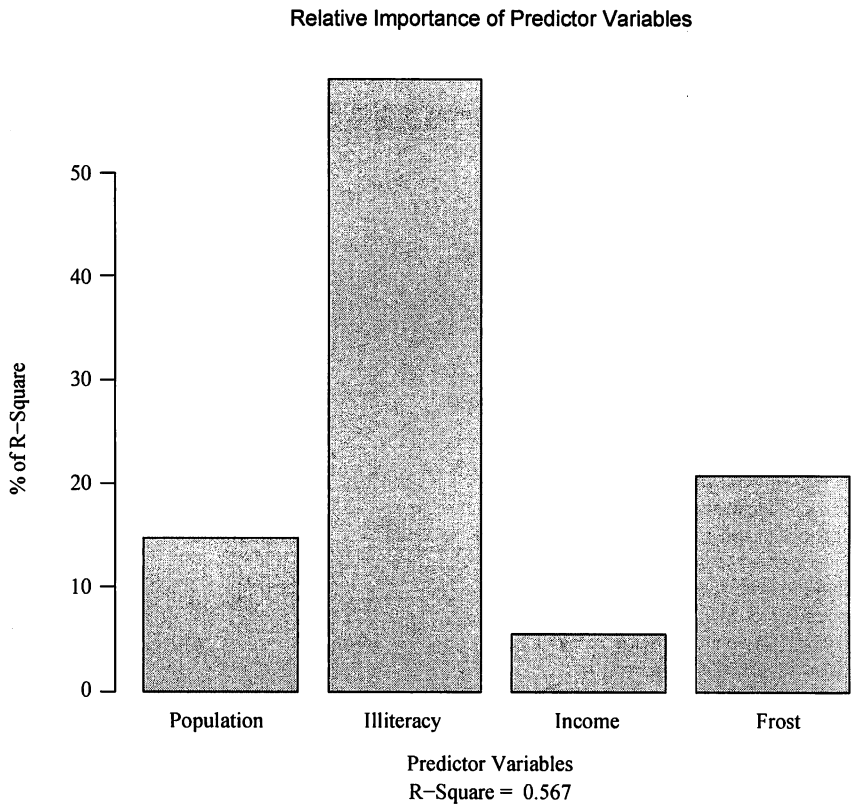


图8-19　states多元回归中各变量相对权重的柱状图

相对重要性的测量（特别是相对权重方法）有广泛的应用，它比标准化回归系数更为直观，我期待将来有更多的人使用它。

8.8 小结

在统计中，回归分析是许多方法的一个总称。相信你已经看到，它是一个交互性很强的方法，包括拟合模型、检验统计假设、修正数据和模型，以及为达到最终结果的再拟合等过程。从很多角度来看，获得模型的最终结果也是一种艺术和技巧，堪与自然科学相媲美。

由于回归分析是一个有很多步骤的过程，所以本章相对较长。我们先讨论了如何拟合OLS回归模型、如何使用回归诊断评估数据是否符合统计假设，以及一些修正数据使其符合假设的方法。然后，我们介绍了一些从众多可能模型中选出最终回归模型的途径，学习了如何评价模型在新样本上的表现。最后，我们又解决了变量重要性这个恼人的问题：鉴别哪个变量对预测最为重要。

本章的每个例子中，预测变量都是定量的。但是，并没有任何限制不允许使用类别型变量作为预测变量。使用诸如性别、处理方式或者生产过程这类类别型变量，可以鉴别出响应变量或结果变量的组间差别。这便是我们下章的主题。

第9章 方差分析

本章内容

- R中基本的实验设计建模
- 拟合并解释方差分析模型
- 检验模型假设

第7章中，我们已经看到了通过量化的预测变量来预测量化的响应变量的回归模型。但这并不是说我们不能将名义型或有序型因子作为预测变量进行建模。当包含的因子是解释变量时，我们关注的重点通常会从预测转向组别差异的分析，这种分析法称作*方差分析*（ANOVA）。ANOVA在各种实验和准实验设计的分析中都有广泛应用。本章将介绍用于常见研究设计分析的R函数。

首先我们将回顾实验设计中的术语，随后讨论R拟合ANOVA模型的方法，然后再通过示例对常见的实验设计分析进行阐释。在这些示例中，你将遇到许多有趣的实验，比如治疗焦虑症、降低胆固醇水平、帮助怀孕小鼠生下胖宝宝、确保豚鼠的牙齿长长、促进植物呼吸、学习如何摆放货架等。

对于这些例子，除了R中的基础包，你还需加载`car`、`gplots`、`HH`、`rrcov`和`mvoutlier`包。运行后面的代码示例时，请确保已安装以上这些包。

9.1 术语速成

实验设计和方差分析都有自己相应的语言。在讨论实验设计分析前，我们先快速回顾一些重要的术语，并通过对一系列复杂度逐步增加的实验设计的学习，引入模型最核心的思想。

以焦虑症治疗为例，现有两种治疗方案：认知行为疗法（CBT）和眼动脱敏再加工法（EMDR）。我们招募10个焦虑症患者作为志愿者，随机分配一半的人接受为期五周的CBT，另外一半接受为期五周的EMDR，设计方案如表9-1所示。在治疗结束时，要求每个患者都填写状态特质焦虑问卷（STAI），也就是一份焦虑度测量的自我评测报告。

表9-1 单因素组间方差分析

治疗方案	
CBT	EMDR
s1	s6
s2	s7
s3	s8
s4	s9
s5	s10

在这个实验设计中，治疗方案（treatment）是两水平（CBT、EMDR）的组间因子，之所以称作组间因子是因为每个患者都仅被分配到一个组别中，没有患者同时接受CBT和EMDR。表中字母s代表受试者（患者），STAI是因变量，治疗方案是自变量。由于在每种治疗方案下观测数相等，因此这种设计也称为均衡设计（balanced design）；若观测数不同，则称作非均衡设计（unbalanced design）。

因为仅有一个类别型变量，表9-1的统计设计又称为单因素方差分析（one-way ANOVA），或进一步称为单因素组间方差分析。方差分析主要通过F检验来进行效果评测，若治疗方案的F检验显著，则说明五个星期后两种疗法的STAI得分均值不同。

假设你只对CBT的效果感兴趣，则需将10个患者都放在CBT组中，然后在治疗五周和六个月后分别评价疗效，设计方案如表9-2所示。

表9-2 单因素组内方差分析

患　者	时　间	
	5周	6个月
s1		
s2		
s3		
s4		
s5		
s6		
s7		
s8		
S9		
s10		

此时，时间（time）是两水平（五周、六个月）的组内因子。因为每个患者在所有水平下都进行了测量，因此这种统计设计称单因素组内方差分析；又由于每个受试者都不止一次被测量，也称作重复测量方差分析。当时间的F检验显著时，说明患者的STAI得分均值在五周和六个月间发生了改变。

现假设你对治疗方案差异和它随时间的改变都感兴趣，则将两个设计结合起来即可：随机分配五个患者到CBT，另外五个到EMDR，在五周和六个月后分别评价他们的STAI结果（见表9-3）。

表9-3　含组间和组内因子的双因素方差分析

		患　者	时　间	
			5周	6个月
疗法	CBT	s1 s2 s3 s4 s5		
	EMDR	s6 s7 s8 s9 s10		

疗法（therapy）和时间（time）都作为因子时，我们既可分析疗法的影响（时间跨度上的平均）和时间的影响（疗法类型跨度上的平均），又可分析疗法和时间的交互影响。前两个称作*主效应*，交互部分称作*交互效应*。

当设计包含两个甚至更多的因子时，便是*因素方差分析*设计，比如两因子时称作双因素方差分析，三因子时称作三因素方差分析，以此类推。若因子设计包括组内和组间因子，又称作*混合模型方差分析*，当前的例子就是典型的双因素混合模型方差分析。

本例中，你将做三次F检验：疗法因素一次，时间因素一次，两者交互因素一次。若疗法结果显著，说明CBT和EMDR对焦虑症的治疗效果不同；若时间结果显著，说明焦虑度从五周到六个月发生了变化；若两者交互效应显著，说明两种疗法随着时间变化对焦虑症治疗影响不同（也就是说，焦虑度从五周到六个月的改变程度在两种疗法间是不同的）。

现在，我们对上面的实验设计稍微做些扩展。众所周知，抑郁症对病症治疗有影响，而且抑郁症和焦虑症常常同时出现。即使受试者被随机分配到不同的治疗方案中，在研究开始时，两组疗法中的患者抑郁水平就可能不同，任何治疗后的差异都有可能是最初的抑郁水平不同导致的，而不是由于实验的操作问题。抑郁症也可以解释因变量的组间差异，因此它常称为*混淆因素*（confounding factor）。由于你对抑郁症不感兴趣，它也被称作*干扰变数*（nuisance variable）。

假设招募患者时使用抑郁症的自我评测报告，比如白氏抑郁症量表（BDI），记录了他们的抑郁水平，那么你可以在评测疗法类型的影响前，对任何抑郁水平的组间差异进行统计性调整。本案例中，BDI为*协变量*，该设计为*协方差分析*（ANCOVA）。

以上设计只记录了单个因变量情况（STAI），为增强研究的有效性，可以对焦虑症进行其他的测量（比如家庭评分、医师评分，以及焦虑症对日常行为的影响评价）。当因变量不止一个时，设计被称作*多元方差分析*（MANOVA），若协变量也存在，那么就叫*多元协方差分析*（MANCOVA）。

学习进行到现在，你已经掌握了基本的方差分析术语。此时，应该可以让朋友们大开眼界，并和他们讨论如何使用R拟合ANOVA/ANCOVA/MANOVA模型了。

9.2 ANOVA 模型拟合

虽然ANOVA和回归方法都是独立发展而来，但是从函数形式上看，它们都是广义线性模型的特例。用第7章讨论回归时用到的lm()函数也能分析ANOVA模型。不过，本章我们基本都使用aov()函数。两个函数的结果是等同的，但ANOVA的方法学习者更熟悉aov()函数展示结果的格式。为保证完整性，在本章最后我们将提供一个使用lm()的例子。

9.2.1 aov()函数

aov()函数的语法为aov(*formula*, data = *dataframe*)，表9-4列举了表达式中可以使用的特殊符号。表9-4中的y是因变量，字母A、B、C代表因子。

表9-4 R表达式中的特殊符号

符 号	用 法
~	分隔符号，左边为响应变量，右边为解释变量。例如，用A、B和C预测y，代码为y~ A + B + C
+	分隔解释变量
:	表示变量的交互项。例如，用A、B和A与B的交互项来预测y，代码为y~ A + B + A:B
*	表示所有可能交互项。代码y~ A * B * C可展开为y ~ A + B + C + A:B + A:C + B:C + A:B:C
^	表示交互项达到某个次数。代码y ~ (A + B + C)^2可展开为y ~ A + B + C + A:B + A:C + B:C
.	表示包含除因变量外的所有变量。例如，若一个数据框包含变量y、A、B和C，代码y ~ .可展开为y ~ A + B + C

表9-5列举了一些常见的研究设计表达式。在表9-5中，小写字母表示定量变量，大写字母表示组别因子，Subject是对被试者独有的标识变量。

表9-5 常见研究设计的表达式

设 计	表 达 式
单因素ANOVA	y ~ A
含单个协变量的单因素ANCOVA	y ~ x + A
双因素ANOVA	y ~ A * B
含两个协变量的双因素ANCOVA	y ~ x1 + x2 + A*B
随机化区组	y ~ B + A（B是区组因子）
单因素组内ANOVA	y ~ A + Error(Subject/A)
含单个组内因子（W）和单个组间因子（B）的重复测量ANOVA	y ~ B * W + Error(Subject/W)

本章后面将深入探讨几个实验设计的例子。

9.2.2 表达式中各项的顺序

表达式中效应的顺序在两种情况下会造成影响：(a)因子不止一个，并且是非平衡设计；(b)存在协变量。出现任意一种情况时，等式右边的变量都与其他每个变量相关。此时，我们无法清晰地划分它们对因变量的影响。

例如，对于双因素方差分析，若不同处理方式中的观测数不同，那么模型y ~ A*B与模型y ~ B*A的结果不同。

R默认类型I（序贯型）方法计算ANOVA效应（参考补充内容“顺序很重要！”）。第一个模型可以这样写：y ~ A + B + A:B。R中的ANOVA表的结果将评价：

- A对y的影响；
- 控制A时，B对y的影响；
- 控制A和B的主效应时，A与B的交互效应。

顺序很重要！

当自变量与其他自变量或者协变量相关时，没有明确的方法可以评价自变量对因变量的贡献。例如，含因子A、B和因变量y的双因素不平衡因子设计，有三种效应：A和B的主效应，A和B的交互效应。假设你正使用如下表达式对数据进行建模：

```
Y ~ A + B + A:B
```

有三种类型的方法可以分解等式右边各效应对y所解释的方差。

类型I（序贯型）

效应根据表达式中先出现的效应做调整。A不做调整，B根据A调整，A:B交互项根据A和B调整。

类型II（分层型）

效应根据同水平或低水平的效应做调整。A根据B调整，B依据A调整，A:B交互项同时根据A和B调整。

类型III（边界型）

每个效应根据模型其他各效应做相应调整。A根据B和A:B做调整，A:B交互项根据A和B调整。

R默认调用类型I方法，其他软件（比如SAS和SPSS）默认调用类型III方法。

样本大小越不平衡，效应项的顺序对结果的影响越大。一般来说，越基础性的效应越需要放在表达式前面。具体来讲，首先是协变量，然后是主效应，接着是双因素的交互项，再接着是三因素的交互项，以此类推。对于主效应，越基础性的变量越应放在表达式前面，因此性别要放在处理方式之前。有一个基本的准则：若研究设计不是正交的（也就是说，因子和/或协变量相关），一定要谨慎设置效应的顺序。

在讲解具体的例子前，请注意car包中的Anova()函数（不要与标准anova()函数混淆）提供了使用类型II或类型III方法的选项，而aov()函数使用的是类型I方法。若想使结果与其他软件（如SAS和SPSS）提供的结果保持一致，可以使用Anova()函数，细节可参考help(Anova, package = "car")。

9.3　单因素方差分析

单因素方差分析中，你感兴趣的是比较分类因子定义的两个或多个组别中的因变量均值。以

multcomp包中的cholesterol数据集为例（取自Westfall，Tobia，Rom，Hochberg，1999），50个患者均接受降低胆固醇药物治疗（trt）五种疗法中的一种疗法。其中三种治疗条件使用药物相同，分别是20 mg一天一次（1time）、10 mg一天两次（2times）和5 mg一天四次（4times）。剩下的两种方式（drugD和drugE）代表候选药物。哪种药物疗法降低胆固醇（响应变量）最多呢？分析过程见代码清单9-1。

代码清单9-1 单因素方差分析

```
> library(multcomp)
> attach(cholesterol)
> table(trt)                                  ❶ 各组样本大小
trt
 1time 2times 4times  drugD  drugE
    10     10     10     10     10

> aggregate(response, by=list(trt), FUN=mean)   ❷ 各组均值
  Group.1     x
1   1time  5.78
2  2times  9.22
3  4times 12.37
4   drugD 15.36
5   drugE 20.95

> aggregate(response, by=list(trt), FUN=sd)     ❸ 各组标准差
  Group.1    x
1   1time 2.88
2  2times 3.48
3  4times 2.92
4   drugD 3.45
5   drugE 3.35

                                              ❹ 检验组间差异（ANOVA）
> fit <- aov(response ~ trt)
> summary(fit)
            Df Sum Sq   Mean Sq    F value          Pr(>F)
trt          4   1351       338       32.4     9.8e-13   ***
Residuals   45    469        10
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

                                              ❺ 绘制各组均值及其置信区间的图形
> library(gplots)
> plotmeans(response ~ trt, xlab="Treatment", ylab="Response",
     main="Mean Plot\nwith 95% CI")
> detach(cholesterol)
```

从输出结果可以看到，每10个患者接受其中一个药物疗法❶。均值显示drugE降低胆固醇最多，而1time降低胆固醇最少❷，各组的标准差相对恒定，在2.88到3.48间浮动❸。ANOVA对治疗方式（trt）的F检验非常显著（p<0.0001），说明五种疗法的效果不同❹。

gplots包中的plotmeans()可以用来绘制带有置信区间的组均值图形❺。如图9-1所示，图形展示了带有95%的置信区间的各疗法均值，可以清楚看到它们之间的差异。

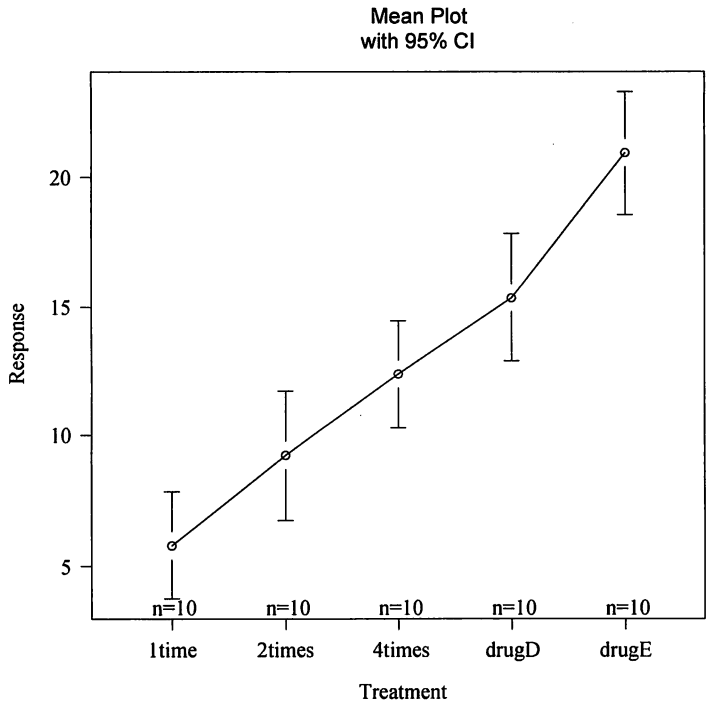


图9-1　五种降低胆固醇药物疗法的均值，含95%的置信区间

9.3.1　多重比较

虽然ANOVA对各疗法的F检验表明五种药物疗法效果不同，但是并没有告诉你哪种疗法与其他疗法不同。多重比较可以解决这个问题。例如，TukeyHSD()函数提供了对各组均值差异的成对检验（见代码清单9-2）。但要注意TukeyHSD()函数与本章使用的HH包存在兼容性问题：若载入HH包，TukeyHSD()函数将会失效。对于上例，使用detach("package::HH")将它从搜寻路径中删除，然后再调用TukeyHSD()。

代码清单9-2　Tukey HSD的成对组间比较

```
> TukeyHSD(fit)
  Tukey multiple comparisons of means
    95% family-wise confidence level

Fit: aov(formula = response ~ trt)

$trt
               diff    lwr   upr p adj
2times-1time   3.44 -0.658  7.54 0.138
4times-1time   6.59  2.492 10.69 0.000
drugD-1time    9.58  5.478 13.68 0.000
```

```
drugE-1time    15.17 11.064 19.27 0.000
4times-2times   3.15 -0.951  7.25 0.205
drugD-2times    6.14  2.035 10.24 0.001
drugE-2times   11.72  7.621 15.82 0.000
drugD-4times    2.99 -1.115  7.09 0.251
drugE-4times    8.57  4.471 12.67 0.000
drugE-drugD     5.59  1.485  9.69 0.003

> par(las=2)
> par(mar=c(5,8,4,2))
> plot(TukeyHSD(fit))
```

可以看到，1time和2times的均值差异不显著（p=0.138），而1time和4times间的差异非常显著（p<0.001）。

成对比较图形如图9-2所示。第一个par语句用来旋转轴标签，第二个用来增大左边界的面积，可使标签摆放更美观（par选项参见第3章）。图形中置信区间包含0的疗法说明差异不显著（p>0.05）。

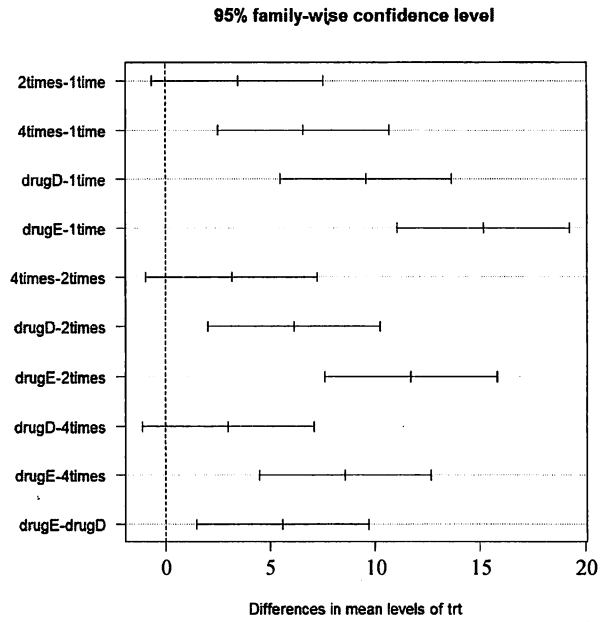


图9-2 Tukey HSD均值成对比较图

multcomp包中的glht()函数提供了多重均值比较更为全面的方法，既适用于线性模型（如本章各例），也适用于广义线性模型（见第13章）。下面的代码重现了Tukey HSD检验，并用一个不同的图形对结果进行展示（图9-3）：

```
> library(multcomp)
> par(mar=c(5,4,6,2))
> tuk <- glht(fit, linfct=mcp(trt="Tukey"))
> plot(cld(tuk, level=.05),col="lightgrey")
```

上面的代码中，为适合字母阵列摆放，par语句增大了顶部边界面积。cld()函数中的level选项设置了使用的显著水平（0.05，即本例中的95%的置信区间）。

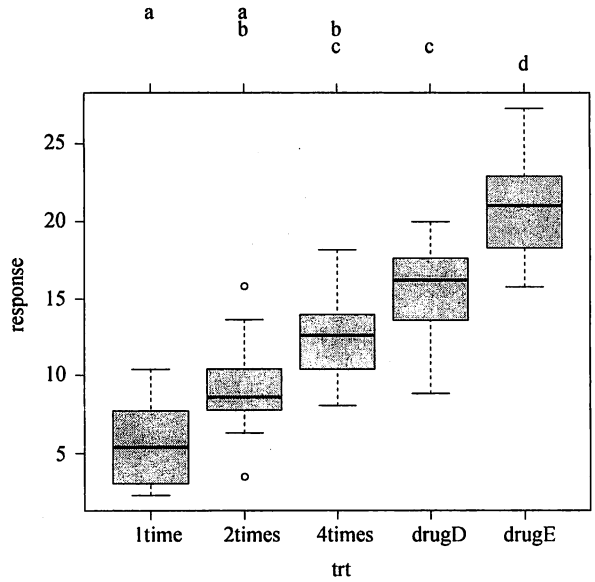


图9-3　multcomp包中的Tukey HSD检验

有相同字母的组（用箱线图表示）说明均值差异不显著。可以看到，1time和2times差异不显著（有相同的字母a），2times和4times差异也不显著（有相同的字母b），而1time和4times差异显著（它们没有共同的字母）。个人认为，图9-3比图9-2更好理解，而且还提供了各组得分的分布信息。

从结果来看，使用降低胆固醇的药物时，一天四次5 mg剂量比一天一次20 mg剂量效果更佳，也优于候选药物drugD，但药物drugE比其他所有药物和疗法都更优。

多重比较方法是一个复杂但正迅速发展的领域，想了解更多，可参考Bretz、Hothorn和Westfall的*Multiple Comparisons Using R*（2010）一书。

9.3.2　评估检验的假设条件

上一章已经提过，我们对于结果的信心依赖于做统计检验时数据满足假设条件的程度。单因素方差分析中，我们假设因变量服从正态分布，各组方差相等。可以使用Q-Q图来检验正态性假设：

```
> library(car)
> qqPlot(lm(response ~ trt, data=cholesterol),
         simulate=TRUE, main="Q-Q Plot", labels=FALSE)
```

注意qqPlot()要求用lm()拟合。图形如图9-4所示。

数据落在95%的置信区间范围内，说明满足正态性假设。

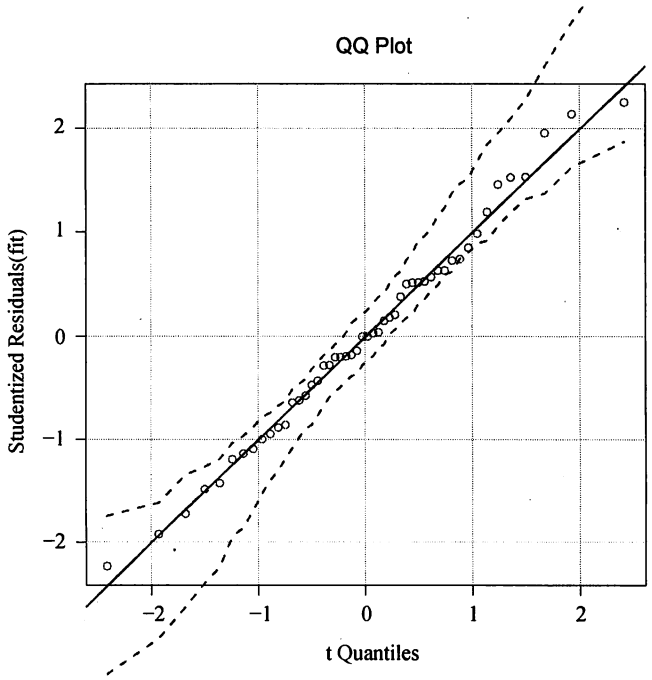


图9-4 正态性检验

R提供了一些可用来做方差齐性检验的函数。例如，可以通过如下代码来做Bartlett检验：

```
> bartlett.test(response ~ trt, data=cholesterol)

        Bartlett test of homogeneity of variances

data:  response by trt
Bartlett's K-squared = 0.5797, df = 4, p-value = 0.9653
```

Bartlett检验表明五组的方差并没有显著不同（p=0.97）。其他检验如Fligner-Killeen检验（`fligner.test()`函数）和Brown-Forsythe检验（HH包中的`hov()`函数）此处没有做演示，但它们获得的结果与Bartlett检验相同。

不过，方差齐性分析对离群点非常敏感。可利用car包中的`outlierTest()`函数来检测离群点：

```
> library(car)
> outlierTest(fit)

No Studentized residuals with Bonferonni p < 0.05
Largest |rstudent|:
   rstudent unadjusted p-value Bonferonni p
19 2.251149           0.029422           NA
```

从输出结果来看，并没有证据说明胆固醇数据中含有离群点（当p>1时将产生NA）。因此根据Q-Q图、Bartlett检验和离群点检验，该数据似乎可以用ANOVA模型拟合得很好。这些方法反过来增强了我们对于所得结果的信心。

9.4 单因素协方差分析

单因素协方差分析（ANCOVA）扩展了单因素方差分析（ANOVA），包含一个或多个定量的协变量。下面的例子来自于multcomp包中的litter数据集（见Westfall et al.，1999）。怀孕小鼠被分为四个小组，每个小组接受不同剂量（0、5、50或500）的药物处理。产下幼崽的体重均值为因变量，怀孕时间为协变量。分析代码见代码清单9-3。

代码清单9-3　单因素ANCOVA

```
> data(litter, package="multcomp")
> attach(litter)
> table(dose)
dose
  0   5  50 500
 20  19  18  17
> aggregate(weight, by=list(dose), FUN=mean)
  Group.1    x
1       0 32.3
2       5 29.3
3      50 29.9
4     500 29.6
> fit <- aov(weight ~ gesttime + dose)
> summary(fit)
            Df  Sum Sq Mean Sq F value   Pr(>F)
gesttime     1  134.30  134.30  8.0493 0.005971 **
dose         3  137.12   45.71  2.7394 0.049883 *
Residuals   69 1151.27   16.69
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

利用table()函数，可以看到每种剂量下所产的幼崽数并不相同：0剂量时（未用药）产崽20个，500剂量时产崽17个。再用aggregate()函数获得各组均值，可以发现未用药组幼崽体重均值最高（32.3）。ANCOVA的F检验表明：(a)怀孕时间与幼崽出生体重相关；(b)控制怀孕时间，药物剂量与出生体重相关。控制怀孕时间，确实发现每种药物剂量下幼崽出生体重均值不同。

由于使用了协变量，你可能想要获取调整的组均值——即去除协变量效应后的组均值。可使用effects包中的effects()函数来计算调整的均值：

```
> library(effects)
> effect("dose", fit)

 dose effect
dose
   0    5   50  500
32.4 28.9 30.6 29.3
```

本例中，调整的均值与aggregate()函数得出的未调整的均值类似，但并非所有的情况都是如此。总之，effects包为复杂的研究设计提供了强大的计算调整均值的方法，并能将结果可视化，更多细节可参考CRAN上的文档。

和上一节的单因素ANOVA例子一样，剂量的F检验虽然表明了不同的处理方式幼崽的体重均

值不同，但无法告知我们哪种处理方式与其他方式不同。同样，我们使用multcomp包来对所有均值进行成对比较。另外，multcomp包还可以用来检验用户自定义的均值假设。

假定你对未用药条件与其他三种用药条件影响是否不同感兴趣。代码清单9-4可以用来检验你的假设。

代码清单9-4 对用户定义的对照的多重比较

```
> library(multcomp)
> contrast <- rbind("no drug vs. drug" = c(3, -1, -1, -1))
> summary(glht(fit, linfct=mcp(dose=contrast)))

Multiple Comparisons of Means: User-defined Contrasts
Fit: aov(formula = weight ~ gesttime + dose)

Linear Hypotheses:
                      Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
no drug vs. drug == 0    8.284      3.209   2.581   0.0120 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

对照c(3, -1, -1, -1)设定第一组和其他三组的均值进行比较。假设检验的t统计量（2.581）在p<0.05水平下显著，因此，可以得出未用药组比其他用药条件下的出生体重高的结论。其他对照可用rbind()函数添加（详见help(glht)）。

9.4.1 评估检验的假设条件

ANCOVA与ANOVA相同，都需要正态性和同方差性假设，可以用9.3.2节中相同的步骤来检验这些假设条件。另外，ANCOVA还假定回归斜率相同。本例中，假定四个处理组通过怀孕时间来预测出生体重的回归斜率都相同。ANCOVA模型包含怀孕时间*剂量的交互项时，可对回归斜率的同质性进行检验。交互效应若显著，则意味着时间和幼崽出生体重间的关系依赖于药物剂量的水平。代码和结果见代码清单9-5。

代码清单9-5 检验回归斜率的同质性

```
> library(multcomp)
> fit2 <- aov(weight ~ gesttime*dose, data=litter)
> summary(fit2)
              Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
gesttime       1    134     134    8.29 0.0054 **
dose           3    137      46    2.82 0.0456 *
gesttime:dose  3     82      27    1.68 0.1789
Residuals     66   1069      16
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

可以看到交互效应不显著，支持了斜率相等的假设。若假设不成立，可以尝试变换协变量或因变量，或使用能对每个斜率独立解释的模型，或使用不需要假设回归斜率同质性的非参数ANCOVA方法。sm包中的sm.ancova()函数为后者提供了一个例子。

9.4.2 结果可视化

HH包中的ancova()函数可以绘制因变量、协变量和因子之间的关系图。例如代码：

```
> library(HH)
> ancova(weight ~ gesttime + dose, data=litter)
```

生成的图形如图9-5所示。注意，为了适应黑白印刷，图形已经过修改。因此，你自己运行上面代码所得图形会略有不同。

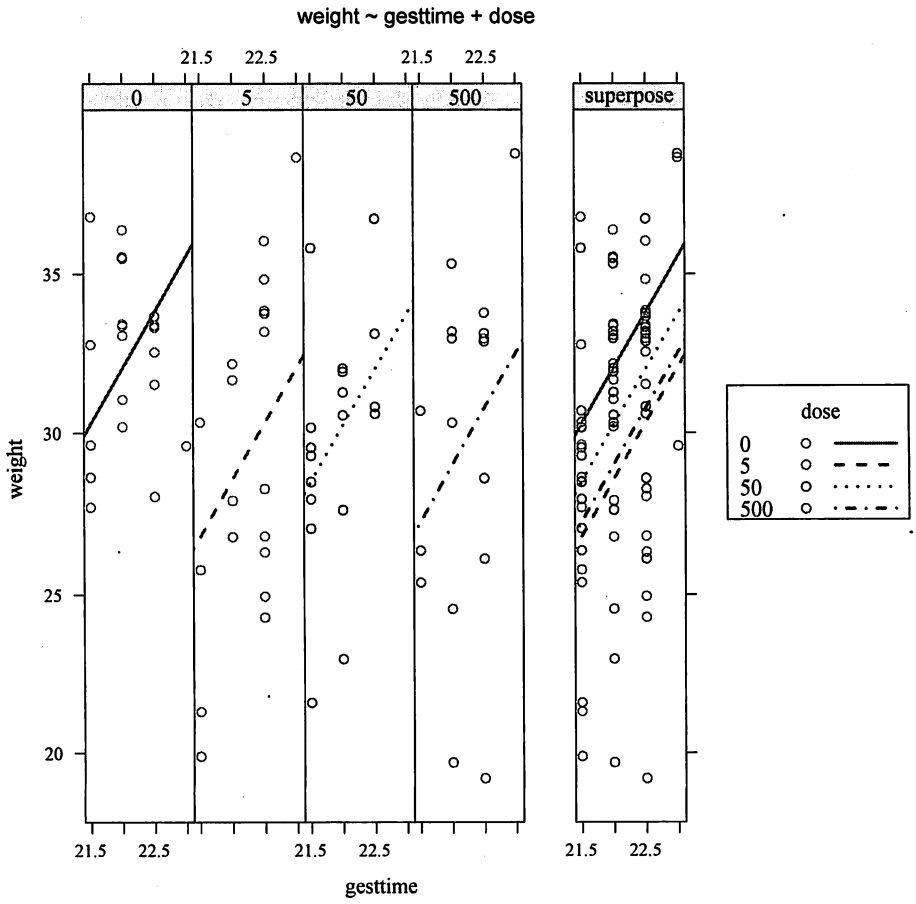


图9-5　四种药物处理组的怀孕时间和出生体重的关系图

从图中可以看到，用怀孕时间来预测出生体重的回归线相互平行，只是截距项不同。随着怀孕时间增加，幼崽出生体重也会增加。另外，还可以看到0剂量组截距项最大，5剂量组截距项最小。由于你上面的设置，直线会保持平行，若用ancova(weight ~ gesttime*dse)，生成的图形将允许斜率和截距项依据组别而发生变化，这对可视化那些违背回归斜率同质性的实例非常有用。

9.5 双因素方差分析

在双因素方差分析中，受试者被分配到两因子的交叉类别组中。以基础安装中的ToothGrowth数据集为例，随机分配60只豚鼠，分别采用两种喂食方法（橙汁或维生素C），各喂食方法中抗坏血酸含量有三种水平（0.5 mg、1 mg或2 mg），每种处理方式组合都被分配10只豚鼠。牙齿长度为因变量，分析的代码见代码清单9-6。

代码清单9-6 双因素ANOVA

```
> attach(ToothGrowth)
> table(supp, dose)
    dose
supp 0.5  1  2
  OJ  10 10 10
  VC  10 10 10

> aggregate(len, by=list(supp, dose), FUN=mean)
  Group.1 Group.2     x
1      OJ     0.5 13.23
2      VC     0.5  7.98
3      OJ     1.0 22.70
4      VC     1.0 16.77
5      OJ     2.0 26.06
6      VC     2.0 26.14

> aggregate(len, by=list(supp, dose), FUN=sd)
  Group.1 Group.2    x
1      OJ     0.5 4.46
2      VC     0.5 2.75
3      OJ     1.0 3.91
4      VC     1.0 2.52
5      OJ     2.0 2.66
6      VC     2.0 4.80

> fit <- aov(len ~ supp*dose)
> summary(fit)

            Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
supp         1    205     205   12.32 0.0009 ***
dose         1   2224    2224  133.42 <2e-16 ***
supp:dose    1     89      89    5.33 0.0246 *
Residuals   56    934      17
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

table语句的预处理表明该设计是均衡设计（各设计单元中样本大小都相同），aggregate语句处理可获得各单元的均值和标准差。用summary()函数得到方差分析表，可以看到主效应（supp和dose）和交互效应都非常显著。

有多种方式对结果进行可视化处理。此处可用interaction.plot()函数来展示双因素方差分析的交互效应。代码为：

```
interaction.plot(dose, supp, len, type="b",
                 col=c("red","blue"), pch=c(16, 18),
                 main = "Interaction between Dose and Supplement Type")
```

结果如图9-6所示。图形展示了各种剂量喂食下豚鼠牙齿长度的均值。

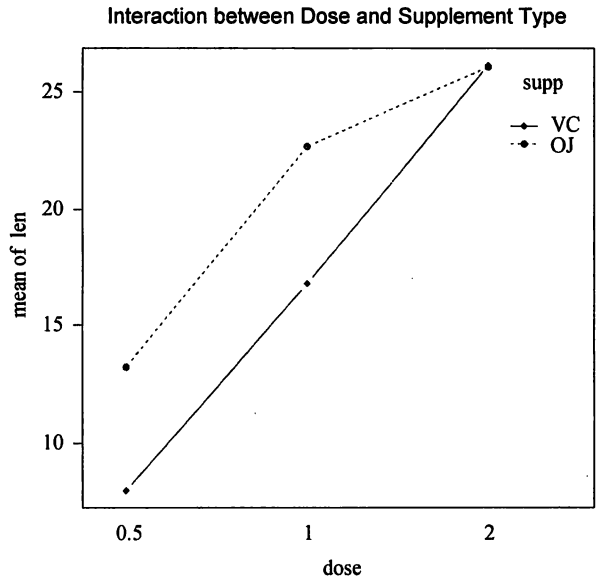


图9-6　喂食方法和剂量对牙齿生长的交互作用。用interaction.plot()函数绘制了牙齿长度的均值

还可以用gplots包中的plotmeans()函数来展示交互效应。生成图形如图9-7所示，代码如下：

```
library(gplots)
plotmeans(len ~ interaction(supp, dose, sep=" "),
          connect=list(c(1,3,5),c(2,4,6)),
          col=c("red", "darkgreen"),
          main = "Interaction Plot with 95% CIs",
          xlab="Treatment and Dose Combination")
```

图形展示了均值、误差棒（95%的置信区间）和样本大小。

最后，你还能用HH包中的interaction2wt()函数来可视化结果，图形对任意顺序的因子设计的主效应和交互效应都会进行展示（图9-8）：

```
library(HH)
interaction2wt(len~supp*dose)
```

同样的，图9-8为适合黑白印刷做了修改，若你运行上面的代码，生成的图形会略有不同。

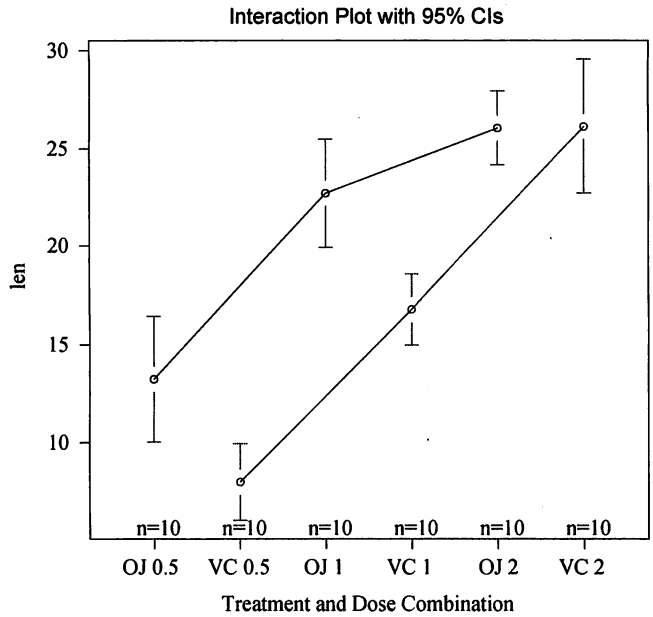


图9-7 喂食方法和剂量对牙齿生长的交互作用。用`plotmeans()`函数绘制的95%的置信区间的牙齿长度均值

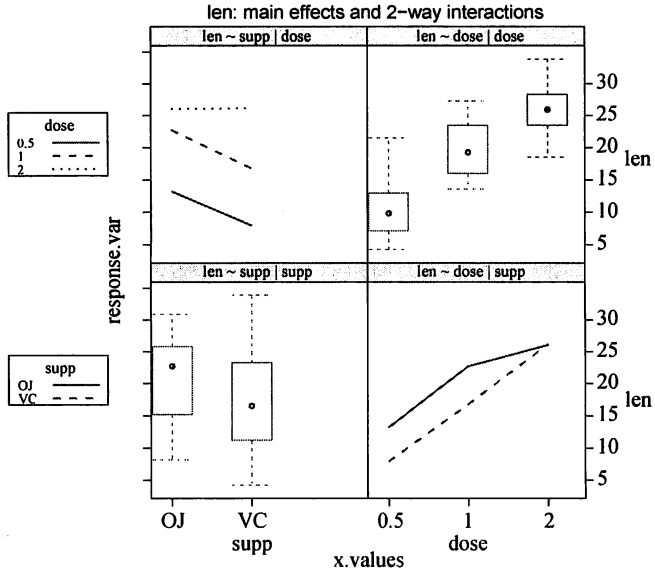


图9-8 `ToothGrowth`数据集的主效应和交互效应。图形由`interaction2way()`函数创建

以上三幅图形都表明随着橙汁和维生素C中的抗坏血酸剂量的增加，牙齿长度变长。对于0.5 mg和1 mg剂量，橙汁比维生素C更能促进牙齿生长；对于2 mg剂量的抗坏血酸，两种喂食方法下牙

齿长度增长相同。三种绘图方法中，我更推荐HH包中的interaction2wt()函数，因为它能展示任意复杂度设计（双因素方差分析、三因素方差分析等）的主效应（箱线图）和交互效应。

此处没有涵盖模型假设检验和均值比较的内容，因为它们只是之前方法的一个自然扩展而已。而且，该设计是均衡的，故而不用担心效应顺序的影响。

9.6 重复测量方差分析

所谓重复测量方差分析，即受试者被测量不止一次。本节重点关注含一个组内和一个组间因子的重复测量方差分析（这是一个常见的设计）。示例来源于生理生态学领域，研究方向是生命系统的生理和生化过程如何响应环境因素的变异（此为应对全球变暖的一个非常重要的研究领域）。基础安装包中的CO2数据集包含了北方和南方牧草类植物Echinochloa crus-galli（Potvin，Lechowicz，Tardif，1990）的寒冷容忍度研究结果，在某浓度二氧化碳的环境中，对寒带植物与非寒带植物的光合作用率进行了比较。研究所用植物一半来自于加拿大的魁北克省，另一半来自美国的密西西比州。

首先，我们关注寒带植物。因变量是二氧化碳吸收量（uptake），单位为ml/L，自变量是植物类型Type（魁北克VS密西西比州）和七种水平（95~1000 umol/m^2 sec）的二氧化碳浓度（conc）。另外，Type是组间因子，conc是组内因子。分析过程见代码清单9-7。

代码清单9-7　含一个组间因子和一个组内因子的重复测量方差分析

```
> w1b1 <- subset(CO2, Treatment=='chilled')
> fit <- aov(uptake ~ conc*Type + Error(Plant/(conc), w1b1)
> summary(fit)

Error: Plant
          Df  Sum Sq Mean Sq F value   Pr(>F)
Type       1 2667.24 2667.24  60.414 0.001477 **
Residuals  4  176.60   44.15
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Error: Plant:conc
          Df Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
conc       1 888.57  888.57  215.46 0.0001253 ***
conc:Type  1 239.24  239.24   58.01 0.0015952 **
Residuals  4  16.50    4.12
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Error: Within
          Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
Residuals 30 869.05   28.97

> par(las=2)
> par(mar=c(10,4,4,2))
> with(w1b1, interaction.plot(conc,Type,uptake,
       type="b", col=c("red","blue"), pch=c(16,18),
       main="Interaction Plot for Plant Type and Concentration"))
```

```
> boxplot(uptake ~ Type*conc, data=wlbl, col=(c("gold", "green")),
        main="Chilled Quebec and Mississippi Plants",
         ylab="Carbon dioxide uptake rate (umol/m^2 sec)")
```

方差分析表表明在0.01的水平下，主效应类型和浓度以及交叉效应类型x浓度都非常显著，图9-9中通过interaction.plot()函数展示了交互效应。

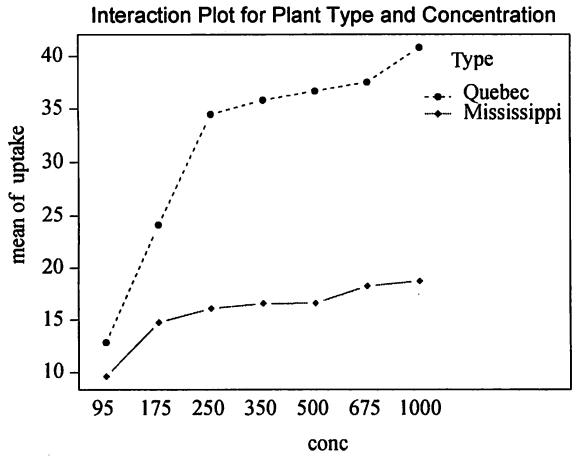


图9-9 CO_2浓度和植物类型对CO_2吸收的交互影响。图形由interaction.plot()函数绘制

若想展示交互效应其他不同的侧面，可以使用boxplot()函数对相同的数据画图，结果见图9-10。

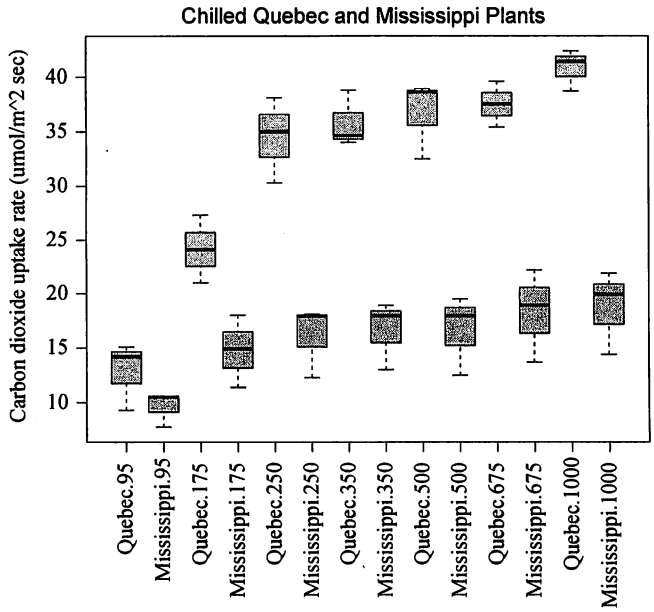


图9-10 CO_2浓度和植物类型对CO_2吸收的交互效应。图形由boxplot()函数绘制

从以上任意一幅图都可以看出，魁北克省的植物比密西西比州的植物二氧化碳吸收率高，而且随着CO_2浓度的升高，差异越来越明显。

注意　通常处理的数据集是宽格式（wide format），即列是变量，行是观测值，而且一行一个受试对象。9.4节中的`litter`数据框就是一个很好的例子。不过在处理重复测量设计时，需要有长格式（long format）数据才能拟合模型。在长格式中，因变量的每次测量都要放到它独有的行中，`CO2`数据集即该种形式。幸运的是，5.6.3节的`reshape`包可方便地将数据转换为相应的格式。

混合模型设计的各种方法

在分析本节关于CO_2的例子时，我们使用了传统的重复测量方差分析。该方法假设任意组内因子的协方差矩阵为球形，并且任意组内因子两水平间的方差之差都相等。但在现实中这种假设不可能满足，于是衍生了一系列备选方法：

- 使用`lme4`包中的`lmer()`函数拟合线性混合模型（Bates，2005）；
- 使用`car`包中的`Anova()`函数调整传统检验统计量以弥补球形假设的不满足（例如Geisser-Greenhouse校正）；
- 使用`nlme`包中的`gls()`函数拟合给定方差-协方差结构的广义最小二乘模型（UCLA，2009）；
- 用多元方差分析对重复测量数据进行建模（Hand，1987）。

以上方法已超出本书范畴，如果你对这些方法感兴趣，可以参考Pinheiro & Bates（2000）、Zuur et al.（2009）。

目前为止，本章都只是对单个因变量的情况进行分析，在下一节，我们将简略介绍多个结果变量的设计。

9.7　多元方差分析

当因变量（结果变量）不止一个时，可用多元方差分析（MANOVA）对它们同时进行分析。以`MASS`包中的`UScereal`数据集为例[Venables，Ripley（1999）]，我们将研究美国谷物中的卡路里、脂肪和糖含量是否会因为储存架位置的不同而发生变化。其中1代表底层货架，2代表中层货架，3代表顶层货架。卡路里、脂肪和糖含量是因变量，货架是三水平（1、2、3）的自变量。分析过程见代码清单9-8。

代码清单9-8　单因素多元方差分析

```
> library(MASS)
> attach(UScereal)
> y <- cbind(calories, fat, sugars)
> aggregate(y, by=list(shelf), FUN=mean)
```

```
  Group.1 calories   fat sugars
1       1      119 0.662    6.3
2       2      130 1.341   12.5
3       3      180 1.945   10.9
> cov(y)
         calories   fat sugars
calories   3895.2 60.67 180.38
fat          60.7  2.71   4.00
sugars      180.4  4.00  34.05
> fit <- manova(y ~ shelf)
> summary(fit)
          Df Pillai approx F num Df den Df  Pr(>F)
shelf      1 0.1959   4.9550      3     61 0.00383 **
Residuals 63
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

> summary.aov(fit)
 Response calories :
            Df  Sum Sq  Mean Sq  F value          Pr(>F)
shelf        1   45313   45313   13.995 0.0003983  ***
Residuals   63  203982    3238
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

 Response fat :
            Df   Sum Sq   Mean Sq  F value        Pr(>F)
shelf        1   18.421   18.421   7.476 0.008108  **
Residuals   63  155.236    2.464
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

 Response sugars :
            Df   Sum Sq   Mean Sq  F value       Pr(>F)
shelf        1   183.34   183.34   5.787 0.01909   *
Residuals   63  1995.87    31.68
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

输出单变量结果

代码清单9-8中，cbind()函数将三个因变量（卡路里、脂肪和糖）合并成一个矩阵。aggregate()函数可获取货架的各个均值，cov()则输出各谷物间的方差和协方差。

manova()函数能对组间差异进行多元检验。上面F值显著，说明三个组的营养成分测量值不同。

由于多元检验是显著的，因此可以使用summary.aov()函数对每一个变量做单因素方差分析。从上述结果可以看到，三组中每种营养成分的测量值都是不同的。另外，还可以用均值比较步骤（比如TukeyHSD）来判断对于每个因变量，哪种货架与其他货架都是不同的（此处已略去，以节省空间）。

9.7.1 评估假设检验

单因素多元方差分析有两个前提假设，一个是多元正态性，一个是方差-协方差矩阵同质性。

第一个假设即指因变量组合成的向量服从一个多元正态分布。可以用Q-Q图来检验该假设条件（参见补充内容“理论补充”对其工作原理的统计解释）。

理论补充

若有一个p*1的多元正态随机向量x，均值为μ，协方差矩阵为Σ，那么x与μ的马氏距离的平方服从自由度为p的卡方分布。Q-Q图展示卡方分布的分位数，横纵坐标分别是样本量与马氏距离平方值。如果点全部落在斜率为1、截距项为0的直线上，则表明数据服从多元正态分布。

分析代码见代码清单9-9，结果见图9-11。

代码清单9-9　检验多元正态性

```
> center <- colMeans(y)
> n <- nrow(y)
> p <- ncol(y)
> cov <- cov(y)
> d <- mahalanobis(y,center,cov)
> coord <- qqplot(qchisq(ppoints(n),df=p),
    d, main="Q-Q Plot Assessing Multivariate Normality",
    ylab="Mahalanobis D2")
> abline(a=0,b=1)
> identify(coord$x, coord$y, labels=row.names(UScereal))
```

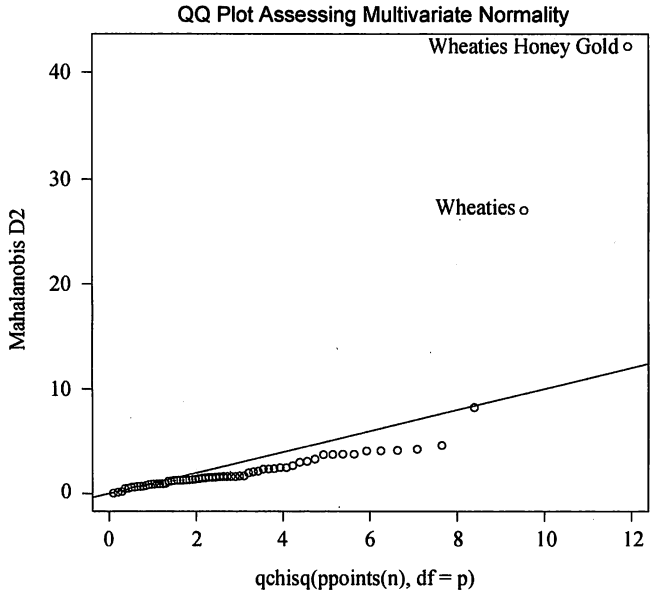


图9-11　检验多元正态性的Q-Q图

若数据服从多元正态分布，那么点将落在直线上。你能通过identify()函数（参见16.4节）

交互性地对图中的点进行鉴别。从图形上看，观测点“Wheaties Honey Gold”和“Wheaties”异常，数据集似乎违反了多元正态性。可以删除这两个点再重新分析。

方差-协方差矩阵同质性即指各组的协方差矩阵相同，通常可用Box's M检验来评估该假设。由于R中没有Box's M函数，可以通过网络搜索找到合适的代码。另外，该检验对正态性假设很敏感，会导致在大部分案例中直接拒绝同质性假设。也就是说，对于这个重要的假设的检验，我们目前还没有一个好方法[但是可以参考Anderson（2006）和Silva et al.（2008）提供的一些有趣的备选方法，虽然在R中还没有实现]。

最后，还可以使用mvoutlier包中的ap.plot()函数来检验多元离群点。代码如下：

```
library(mvoutlier)
outliers <- aq.plot(y)
outliers
```

自己尝试一下，看看会得到什么结果吧！

9.7.2 稳健多元方差分析

如果多元正态性或者方差-协方差均值假设都不满足，又或者你担心多元离群点，那么可以考虑用稳健或非参数版本的MANOVA检验。稳健单因素MANOVA可通过rrcov包中的Wilks.test()函数实现。vegan包中的adonis()函数则提供了非参数MANOVA的等同形式。代码清单9-10是Wilks.test()的应用。

代码清单9-10 稳健单因素MANOVA

```
library(rrcov)
> Wilks.test(y,shelf,method="mcd")

        Robust One-way MANOVA (Bartlett Chi2)

data:  x
Wilks' Lambda = 0.511, Chi2-Value = 23.71, DF = 4.85, p-value =
0.0002143
sample estimates:
  calories   fat sugars
1      120 0.701   5.66
2      128 1.185  12.54
3      161 1.652  10.35
```

从结果来看，稳健检验对离群点和违反MANOVA假设的情况不敏感，而且再一次验证了存储在货架顶部、中部和底部的谷物营养成分含量不同。

9.8 用回归来做 ANOVA

在9.2节中，我们提到ANOVA和回归都是广义线性模型的特例。因此，本章所有的设计都可以用lm()函数来分析。但是，为了更好地理解输出结果，需要弄明白在拟合模型时，R是如何处理类别型变量的。

以9.3节的单因素ANOVA问题为例，即比较五种降低胆固醇药物疗法（trt）的影响。

```
> library(multcomp)
> levels(cholesterol$trt)

[1] "1time"  "2times" "4times" "drugD"  "drugE"
```

首先，用aov()函数拟合模型：

```
> fit.aov <- aov(response ~ trt, data=cholesterol)
> summary(fit.aov)

            Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
trt          4 1351.37  337.84  32.433 9.819e-13 ***
Residuals   45  468.75   10.42
```

现在，用lm()函数拟合同样的模型。结果见代码清单9-11。

代码清单9-11　解决9.3节ANOVA问题的回归方法

```
> fit.lm <- lm(response ~ trt, data=cholesterol)
> summary(fit.lm)

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)    5.782      1.021   5.665 9.78e-07 ***
trt2times      3.443      1.443   2.385   0.0213 *
trt4times      6.593      1.443   4.568 3.82e-05 ***
trtdrugD       9.579      1.443   6.637 3.53e-08 ***
trtdrugE      15.166      1.443  10.507 1.08e-13 ***

Residual standard error: 3.227 on 45 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.7425,     Adjusted R-squared: 0.7196
F-statistic: 32.43 on 4 and 45 DF,  p-value: 9.819e-13
```

我们能发现什么？因为线性模型要求预测变量是数值型，当lm()函数碰到因子时，它会用一系列与因子水平相对应的数值型对照变量来代替因子。如果因子有k个水平，将会创建k–1个对照变量。R提供了五种创建对照变量的内置方法（见表9-6），你也可以自己重新创建（此处不做介绍）。默认情况下，对照处理用于无序因子，正交多项式用于有序因子。

表9-6　内置对照

对照变量创建方法	描　述
contr.helmert	第二个水平对照第一个水平，第三个水平对照前两个的均值，第四个水平对照前三个的均值，以此类推
contr.poly	基于正交多项式的对照，用于趋势分析（线性、二次、三次等）和等距水平的有序因子
contr.sum	对照变量之和限制为0。也称作偏差找对，对各水平的均值与所有水平的均值进行比较
contr.treatment	各水平对照基线水平（默认第一个水平）。也称作虚拟编码
contr.SAS	类似于contr.treatment，只是基线水平变成了最后一个水平。生成的系数类似于大部分SAS过程中使用的对照变量

以对照（treatment contrast）为例，因子的第一个水平变成了参考组，随后的变量都以它为

标准。可以通过contrasts()函数查看它的编码过程。

```
> contrasts(cholesterol$trt)
       2times 4times drugD drugE
1time       0      0     0     0
2times      1      0     0     0
4times      0      1     0     0
drugD       0      0     1     0
drugE       0      0     0     1
```

若患者处于drugD条件下，变量drugD等于1，其他变量2times、4times和drugE都等于0。无需列出第一组的变量值，因为其他四个变量都为0，这已经说明患者处于1time条件。

在代码清单9-11中，变量trt2times表示水平1time和2times的一个对照。类似地，trt4times是1time和4times的一个对照，其余以此类推。从输出的概率值来看，各药物条件与第一组（1time）显著不同。

通过设定contrasts选项，可以修改lm()中默认的对照方法。例如，若使用Helmert对照：

```
fit.lm <- lm(response ~ trt, data=cholesterol, contrasts="contr.helmert")
```

还能通过options()函数修改R会话中的默认对照方法，例如，

```
options(contrasts = c("contr.SAS", "contr.helmert"))
```

将设定无序因子默认对比方法为contr.SAS，有序因子的为contr.helmert。虽然我们一直都是在线性模型范围中讨论对照方法的使用，但是在R中，你完全可以将其应用到其他模型中，包括第13章将会介绍的广义线性模型。

9.9 小结

本章中，我们回顾了基本实验和准实验设计的分析方法，包括ANOVA/ANCOVA/MANOVA。然后通过组内和组间设计的示例介绍了基本方法的使用，如单因素ANOVA、单因素ANCOVA、双因素ANOVA、重复测量ANOVA和单因素MANOVA。

除了这些基本分析，我们还回顾了模型的假设检验，以及应用多重比较过程来做综合检验的方法。最后，对各种结果可视化方法也进行了探索。如果你对用R分析DOE（Design Of Experiment，实验设计）感兴趣，请参阅“CRAN Task View: Design of Experiments (DoE) & Analysis of Experimental Data”[①]中Groemping（2009）提供的方法。

第8章和第9章已经涵盖了各领域研究者常用的统计方法。在下一章中，我们将介绍功效分析。功效分析可以帮助我们在给定置信度的情况下，判断达到要求效果所需的样本大小，这一点对于研究设计非常重要。

① CRAN上实验设计的Task View页面地址为http://cran.r-project.org/web/ views/ExperimentalDesign.html。——译者注

第10章 功效分析

本章内容

- 判断所需样本量
- 计算效应值
- 评价统计功效

作为统计咨询师，我经常会被问到这样一个问题："我的研究到底需要多少个受试者呢？"或者换个说法："对于我的研究，现有x个可用的受试者，这样的研究值得做吗？"这类问题都可用通过*功效分析*（power analysis）来解决，它在实验设计中占有重要地位。

功效分析可以帮助在给定置信度的情况下，判断检测到给定效应值时所需的样本量。反过来，它也可以帮助你在给定置信度水平情况下，计算在某样本量内能检测到给定效应值的概率。如果概率低得难以接受，修改或者放弃这个实验将是一个明智的选择。

在本章中，你将学习如何对多种统计检验进行功效分析，包括比例检验、t检验、卡方检验、平衡的单因素ANOVA、相关性分析，以及线性模型分析。由于功效分析针对的是假设检验，我们将首先简单回顾零假设显著性检验（NHST）过程，然后学习如何用R进行功效分析，主要关注于pwr包。最后，我们还会学习R中其他可用的功效分析方法。

10.1 假设检验速览

为了帮助你逐步理解功效分析，我们将首先简要回顾统计假设检验的概念。如果你有统计学背景，可直接从10.2节开始阅读。

在统计假设检验中，首先要对总体分布参数设定一个假设（零假设H_0），然后从总体分布中抽样，通过样本计算所得的统计量来对总体参数进行推断。假定零假设为真，如果计算获得观测样本的统计量的概率非常小，便可以拒绝原假设，接受它的对立面（称作备择假设或者研究假设H_1）。

下面通过一个例子来阐述整个过程。假设你想评价使用手机对驾驶员反应时间的影响，则零假设为H_0：$\mu_1-\mu_2=0$，μ_1是驾驶员使用手机时的反应时间均值，μ_2是驾驶员不使用手机时的反应时间均值（此处，$\mu_1-\mu_2$即感兴趣的总体参数）。假如你拒绝该零假设，备择假设或研究假

设就是H_1：$\mu_1-\mu_2 \neq 0$。这等同于$\mu_1 \neq \mu_2$，即两种条件下反应时间的均值不相等。

现挑选一个由不同个体构成的样本，将他们随机分配到任意一种情况中。第一种情况，参与者边打手机，边在一个模拟器中应对一系列驾驶挑战；第二种情况，参与者在一个模拟器中完成一系列相同的驾驶挑战，但不打手机。然后评估每个个体的总体反应时间。

基于样本数据，可计算如下统计量：

$$\left(\bar{X}_1-\bar{X}_2\right)\Big/\left(\frac{S}{\sqrt{n}}\right)$$

其中，$\bar{X}_1$和$\bar{X}_2$分别表示两种情况下的反应时间均值。S是样本标准差，n是各条件下的参与者数目。如果零假设为真，那么可以假定反应时间呈正态分布，该样本统计量服从$2n-2$自由度的t分布。依据此事实，你能计算获得当前或更大样本统计量的概率。但如果概率（p）比预先设定的阈值小（如$p<0.05$），那么你便可以拒绝原假设接受备择假设。预先约定的阈值（0.05）称为检验的显著性水平（significance level）。

注意，这里是使用取自总体的样本数据来对总体做推断。你的零假设是所有打手机的驾驶员的反应时间均值不同于所有（而不仅仅是你样本中）不打手机的驾驶员的反应时间均值。你的判断有下列四种可能的结果。

- 如果零假设是错误的，统计检验也拒绝它，那么你便做了一个正确的判断。你可以断言使用手机影响反应时间。
- 如果零假设是真实的，你没有拒绝它，那么你再次做了一个正确的判断。说明反应时间不受打手机的影响。
- 如果零假设是真实的，但你却拒绝了它，那么你便犯了I型错误。你会得到使用手机会影响反应时间的结论，而实际上不会。
- 如果零假设是错误的，而你没有拒绝它，那么你便犯了II型错误。使用手机影响反应时间，但你却没有判断出来。

每种结果的解释见下表。

		判断	
		拒绝H_0	不拒绝H_0
真实的	H_0为真	I型错误	正确
	H_0为假	正确	II型错误

零假设显著性检验中的争论

零假设显著性检验并不是没有争议的，批评者早就提出了一大堆质疑，特别是有关它在心理学领域中的应用。他们指出对p值存在一个广泛的误解，它依赖的统计显著性比实际显著性大，因此事实上零假设永远不可能为真，对于足够大的样本也总是被拒绝，这会造成许多逻辑上的不一致。

本书不会深度探讨这一主题，有兴趣的读者可以参考Harlow、Mulaik和Steiger的书*What If There Were No Significance Tests?*（1997）。

在研究过程时，研究者通常关注四个量：样本大小、显著性水平、功效和效应值（见图10-1）。

- 样本大小指的是实验设计中每种条件/组中观测的数目。
- 显著性水平（也称为alpha）由I型错误的概率来定义。也可以把它看做是发现效应不发生的概率。
- 功效通过1减去II型错误的概率来定义。我们可以把它看做是真实效应发生的概率。
- 效应值指的是在备择或研究假设下效应的量。效应值的表达式依赖于假设检验中使用的统计方法。

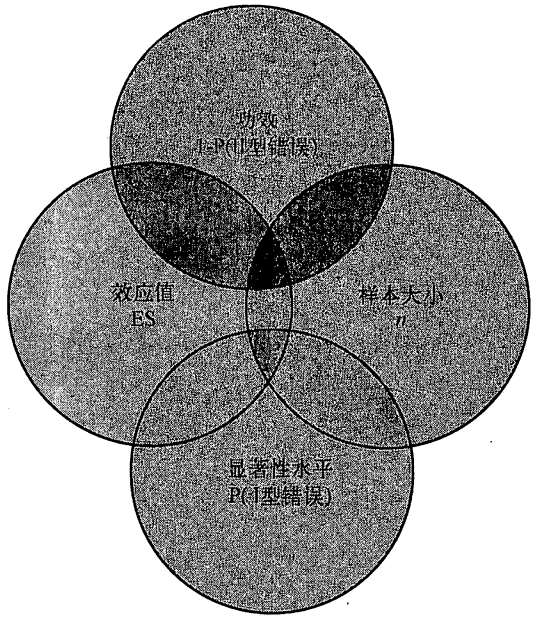


图10-1　在功效分析中研究设计的四个基本量。给定任意三个，你可以推算第四个

虽然研究者可以直接控制样本大小和显著性水平，但是对于功效和效应值的影响却是间接的。例如，放宽显著性水平时（换句话说，使得拒绝原假设更容易时），检验的功效便会增加。类似地，样本量增加，功效也会增加。

通常来说，研究目标是维持一个可接受的显著性水平，尽量使用较少的样本，然后最大化统计检验的功效。也就是说，最大化发现真实效应的几率，并最小化发现错误效应的几率，同时把研究成本控制在合理的范围内。

四个量（样本大小、显著性水平、功效和效应值）紧密相关，给定其中任意三个量，便可推算第四个量。接下来，本章将利用这一点进行各种各样的功效分析。下一节将学习如何用R中的pwr包实现功效分析。随后，我们还会简要回顾一些专门在生物学和遗传学中使用的功效函数。

10.2 用 pwr 包做功效分析

Stéphane Champely开发的pwr包可以实现Cohen（1988）描述的功效分析。表10-1列出了一些非常重要的函数。对于每个函数，用户可以设定四个量（样本大小、显著性水平、功效和效应值）中的三个量，第四个量将由软件计算出来。

表10-1 pwr包中的函数

函 数	功效计算的对象
pwr.2p.test()	两比例（*n*相等）
pwr.2p2n.test()	两比例（*n*不相等）
pwr.anova.test()	平衡的单因素ANOVA
pwr.chisq.test()	卡方检验
pwr.f2.test()	广义线性模型
pwr.p.test()	比例（单样本）
pwr.r.test()	相关系数
pwr.t.test()	t检验（单样本、两样本、配对）
pwr.t2n.test()	t检验（*n*不相等的两样本）

四个量中，效应值是最难规定的。计算效应值通常需要一些相关估计的经验和对过去研究知识的理解。但是如果在一个特定的研究中，你对需要的效应值一无所知，该怎么做呢？10.2.7节将会讨论这个难题。本节接下来介绍pwr包在常见统计检验中的应用。在调用以上函数时，请确定已经安装并载入pwr包。

10.2.1 t检验

对于t检验，pwr.t.test()函数提供了许多有用的功效分析选项，格式为：

```
pwr.t.test(n=, d=, sig.level=, power=, alternative=)
```

其中元素解释如下。

- n为样本大小。
- d为效应值，即标准化的均值之差。

$$d = \frac{\mu_1 - \mu_2}{\sigma}$$

其中 μ_1= 组1均值
μ_2= 组2均值
σ^2 = 误差方差

- sig.level表示显著性水平（默认为0.05）。
- power为功效水平。
- type指检验类型：双样本t检验（two.sample）、单样本t检验（one.sample）或相依样本t检验（paired）。默认为双样本t检验。

- alternative指统计检验是双侧检验（two.sided）还是单侧检验（less或greater）。默认为双侧检验。

让我们举例说明函数的用法。仍继续10.1节使用手机与驾驶反应时间的实验，假定将使用双尾独立样本t检验来比较两种情况下驾驶员的反应时间均值。

如果你根据过去的经验知道反应时间有1.25 s的标准偏差，并认定反应时间1 s的差值是巨大的差异，那么在这个研究中，可设定要检测的效应值为d=1/1.25=0.8或者更大。另外，如果差异存在，你希望有90%的把握检测到它，由于随机变异性的存在，你也希望有95%的把握不会误报差异显著。这时，对于该研究需要多少受试者呢？

将这些信息输入到pwr.t.test()函数中，形式如下：

```
> library(pwr)
> pwr.t.test(d=.8, sig.level=.05, power=.9, type="two.sample",
  alternative="two.sided")

     Two-sample t test power calculation

              n = 34
              d = 0.8
      sig.level = 0.05
          power = 0.9
    alternative = two.sided

 NOTE: n is number in *each* group
```

结果表明，每组中你需要34个受试者（总共68人），这样才能保证有90%的把握检测到0.8的效应值，并且最多5%的可能性会误报差异存在。

现在变化一下这个问题。假定在比较这两种情况时，你想检测到总体均值0.5个标准偏差的差异，并且将误报差异的几率限制在1%内。此外，你能获得的受试者只有40人。那么在该研究中，你能检测到这么大总体均值差异的概率是多少呢？

假定每种情况下受试者数目相同，可以如下操作：

```
> pwr.t.test(n=20, d=.5, sig.level=.01, type="two.sample",
  alternative="two.sided")

     Two-sample t test power calculation

              n = 20
              d = 0.5
      sig.level = 0.01
          power = 0.14
    alternative = two.sided

NOTE: n is number in *each* group
```

结果表明，在0.01的先验显著性水平下，每组20个受试者，因变量的标准差为1.25 s，有低于14%的可能性断言差值为0.625 s或者不显著（d=0.5=0.625/1.25）。换句话说，你将有86%的可能性错过你要寻找的效应值。因此，可能需要慎重考虑要投入到该研究中的时间和精力。

上面的例子都是假定两组中样本大小相等，如果两组中样本大小不同，可用函数：

```
pwr.t2n.test(n1=, n2=, d=, sig.level=, power=, alternative=)
```

此处，n1和n2是两组的样本大小，其他参数含义与pwr.t.test()的相同。可以尝试改变pwr.t2n.test()[1]函数中的参数值，看看输出的效应值如何变化。

10.2.2 方差分析

pwr.anova.test()函数可以对平衡单因素方差分析进行功效分析。格式为：

```
pwr.anova.test(k=, n=, f=, sig.level=, power=)
```

其中，k是组的个数，n是各组中的样本大小。

对于单因素方差分析，效应值可通过f来衡量：

$$f=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{k} p_i \times (\mu_i-\mu)^2}{\sigma^2}}$$

其中，$p_i = n_i/N$，

n_i = 组i的观测数目

N = 总观测数目

μ_i = 组i均值

μ = 总体均值

σ^2 = 组内误差方差

让我们举例说明函数用法。现对五个组做单因素方差分析，要达到0.8的功效，效应值为0.25，并选择0.05的显著性水平，计算各组需要的样本大小。代码如下：

```
> pwr.anova.test(k=5, f=.25, sig.level=.05, power=.8)

     Balanced one-way analysis of variance power calculation

              k = 5
              n = 39
              f = 0.25
      sig.level = 0.05
          power = 0.8

 NOTE: n is number in each group
```

结果表明，总样本大小为5 × 39，即195。注意，本例中需要估计在同方差时五个组的均值。如果你对上述情况都一无所知，10.2.7节提供的方法可能会有所帮助。

10.2.3 相关性

pwr.r.test()函数可以对相关性分析进行功效分析。格式如下：

```
pwr.r.test(n=, r=, sig.level=, power=, alternative=)
```

其中，n是观测数目，r是效应值（通过线性相关系数衡量），sig.level是显著性水平，power是功效水平，alternative指定显著性检验是双边检验（tow.sided）还是单边检验（less或greater）。

假定正在研究抑郁与孤独的关系。你的零假设和研究假设为：

① R中函数名称后面最好加上()。——译者注

H_0: ρ ≤ 0.25 和 H_1: ρ > 0.25

其中，ρ是两个心理变量的总体相关性大小。你设定显著性水平为0.05，而且如果H_0是错误的，你想有90%的信心拒绝H_0，那么研究需要多少观测呢？下面的代码给出了答案：

```
> pwr.r.test(r=.25, sig.level=.05, power=.90, alternative="greater")

     approximate correlation power calculation (arctangh transformation)

              n = 134
              r = 0.25
      sig.level = 0.05
          power = 0.9
    alternative = greater
```

因此，要满足以上要求，你需要134个受试者来评价抑郁与孤独的关系，以便在零假设为假的情况下有90%的信心拒绝它。

10.2.4　线性模型

对于线性模型（比如多元回归），`pwr.f2.test()`函数可以完成相应的功效分析，格式为：

```
pwr.f2.test(u=, v=, f2=, sig.level=, power=)
```

其中，u和v分别是分子自由度和分母自由度，f2是效应值。

$$f^2 = \frac{R^2}{1-R^2}$$　　其中　R^2 = 多重相关性的总体平方值

$$f^2 = \frac{R_{AB}^2 - R_A^2}{1-R_{AB}^2}$$　　其中　$R_A{}^2$ = 集合A中变量对总体方差的解释率[①]

$R_{AB}{}^2$ = 集合A和B中变量对总体方差的解释率

当要评价一组预测变量对结果的影响程度时，适宜用第一个公式来计算f2；当要评价一组预测变量对结果的影响超过第二组变量（协变量）多少时，适宜用第二个公式。

现假设你想研究老板的领导风格对员工满意度的影响，是否超过薪水和工作小费对员工满意度的影响。领导风格可用四个变量来评估，薪水和小费与三个变量有关。过去的经验表明，薪水和小费能够解释约30%的员工满意度的方差。而从现实出发，领导风格至少能解释35%的方差。假定显著性水平为0.05，那么在90%的置信度情况下，你需要多少受试者才能得到这样的方差贡献率呢？

此处，`sig.level = 0.05, power = 0.90, u = 3`（总预测变量数减去集合B中的预测变量数），效应值为f2 = (0.35 − 0.30)/(1 − 0.35) = 0.076 9。将这些信息输入到函数中：

```
> pwr.f2.test(u=3, f2=0.0769, sig.level=0.05, power=0.90)

     Multiple regression power calculation

              u = 3
```

① 也常称作方差贡献率。——译者注

```
          v = 184.2426
         f2 = 0.0769
  sig.level = 0.05
      power = 0.9
```

在多元回归中，分母的自由度等于$N-k-1$，N是总观测数，k是预测变量数。本例中，$N-7-1=185$，即需要样本大小$N=185+7+1=193$。

10.2.5 比例检验

当比较两个比例时，可使用pwr.2p.test()函数进行功效分析。格式为：

```
pwr.2p.test(h=, n=, sig.level=, power=)
```

其中，h是效应值，n是各组相同的样本量。效应值h定义如下：

$$h=2\arcsin\left(\sqrt{p_1}\right)-2\arcsin\left(\sqrt{p_2}\right)$$

可用ES.h(p1, p2)函数进行计算。

当各组中n不相同时，则使用函数：

```
pwr.2p2n.test(h =, n1 =, n2 =, sig.level=, power=).
```

alternative =选项可以设定检验是双尾检验(two.sided)还是单尾检验(less或greater)。默认是双尾检验。

假定你对某流行药物能缓解60%使用者的症状感到怀疑。而一种更贵的新药如果能缓解65%使用者的症状，就会被投放到市场中。此时，在研究中你需要多少受试者才能够检测到两种药物存在这一特定的差异？

假设你想有90%的把握得出新药更有效的结论，并且希望有95%的把握不会误得结论。另外，你只对评价新药是否比标准药物更好感兴趣，因此只需用单边检验，代码如下：

```
> pwr.2p.test(h=ES.h(.65, .6), sig.level=.05, power=.9,
              alternative="greater")

     Difference of proportion power calculation for binomial
     distribution (arcsine transformation)

              h = 0.1033347
              n = 1604.007
      sig.level = 0.05
          power = 0.9
    alternative = greater

 NOTE: same sample sizes
```

根据结果可知，为满足以上要求，在本研究中需要1605个人试用新药，1605个人试用已有药物。

10.2.6 卡方检验

卡方检验常常用来评价两个类别型变量的关系。典型的零假设是变量之间独立，备择假设是不独立。pwr.chisq.test()函数可以评估卡方检验的功效、效应值和所需的样本大小。格式为：

```
pwr.chisq.test(w =, N = , df = , sig.level =, power = )
```

其中，w是效应值，N是总样本大小，df是自由度。此处，效应值w如下定义：

$$w=\sqrt{\sum_{i=1}^{m}\frac{(p0_i-p1_i)^2}{p0_i}}$$

其中　$p0_i=H_0$时第i单元格中的概率
$p1_i=H_1$时第i单元格中的概率

此处从1到m进行求和，连加号上的m指的是列联表中单元格的数目。函数ES.w2(P)可以计算双因素列联表中备择假设的效应值，P是一个假设的双因素概率表。

举一个简单的例子，假设你想研究人种与工作晋升的关系。你预期样本中70%是白种人，10%是美国黑人，20%西班牙裔人。而且，你认为相比30%的美国黑人和50%的西班牙裔人，60%的白种人更容易晋升。研究假设的晋升概率如表10-2所示。

表10-2　研究假设下预期晋升的人群比例

人　种	晋升比例	未晋升者比例
白种人	0.42	0.28
美国黑人	0.03	0.07
西班牙裔	0.10	0.10

从表中看到，你预期总人数的42%是晋升的白种人（0.42 = 0.70 × 0.60），总人数的7%是未晋升的美国黑人（0.07 = 0.10 × 0.70）。让我们取0.05的显著性水平和0.90的预期功效水平。双因素列联表的自由度为$(r-1)(c-1)$，r是行数，c是列数。编写如下代码，你可以计算假设的效应值：

```
> prob <- matrix(c(.42, .28, .03, .07, .10, .10), byrow=TRUE, nrow=3)
> ES.w2(prob)

[1] 0.1853198
```

使用该信息，你又可以计算所需的样本大小：

```
> pwr.chisq.test(w=.1853, df=2, sig.level=.05, power=.9)

     Chi squared power calculation

              w = 0.1853
              N = 368.5317
             df = 2
      sig.level = 0.05
          power = 0.9

 NOTE: N is the number of observations
```

结果表明，在既定的效应值、功效水平和显著性水平下，该研究需要369个受试者才能检验人种与工作晋升的关系。

10.2.7　在新情况中选择合适的效应值

功效分析中，预期效应值是最难决定的参数。它通常需要你对主题有一定的了解，并有相应

的测量经验。例如，过去研究中的数据可以用来计算效应值，这能为后面深层次的研究提供一些参考。

但是当面对全新的研究情况，没有任何过去的经验可借鉴时，你能做些什么呢？在行为科学领域，Cohen（1988）曾尝试提出一个基准，可为各种统计检验划分“小”、“中”、“大”三种效应值。表10-3列出了这些基准值。

表10-3 Cohen效应值基准

统计方法	效应值测量	建议的效应值基准		
		小	中	大
t检验	d	0.20	0.50	0.80
方差分析	f	0.10	0.25	0.40
线性模型	f2	0.02	0.15	0.35
比例检验	h	0.20	0.50	0.80
卡方检验	w	0.10	0.30	0.50

当你对研究的效应值一无所知时，这个表可给你提供一些指引。例如，假如你想在0.05的显著性水平下，对5个组、每组25个受试者的设计进行单因素方差分析，那么拒绝错误零假设（也就是发现真实的效应值）的概率是多大呢？

使用`pwr.anova.test()`函数和表10-3中`f`的建议值，得到对于小效应值功效水平为0.118，中等效应值的为0.574，大效应值的为0.957。给定样本大小的限制，在大效应值时你才可能发现要研究的效应。

另外，你一定要牢记Cohen的基准值仅仅是根据许多社科类研究得出的一般性建议，对于特殊的研究领域可能并不适用。其他可选择的方法是改变研究参数，记录其对诸如样本大小和功效等方面的影响。仍以五个分组的单因素方差分析（显著性水平为0.05）为例，代码清单10-1计算了为检测一系列效应值所需的样本大小，结果见图10-2。

代码清单10-1 单因素ANOVA中检测显著效应所需的样本大小

```
library(pwr)
es <- seq(.1, .5, .01)
nes <- length(es)

samsize <- NULL
for (i in 1:nes){
    result <- pwr.anova.test(k=5, f=es[i], sig.level=.05, power=.9)
    samsize[i] <- ceiling(result$n)
}

plot(samsize,es, type="l", lwd=2, col="red",
     ylab="Effect Size",
     xlab="Sample Size (per cell)",
     main="One Way ANOVA with Power=.90 and Alpha=.05")
```

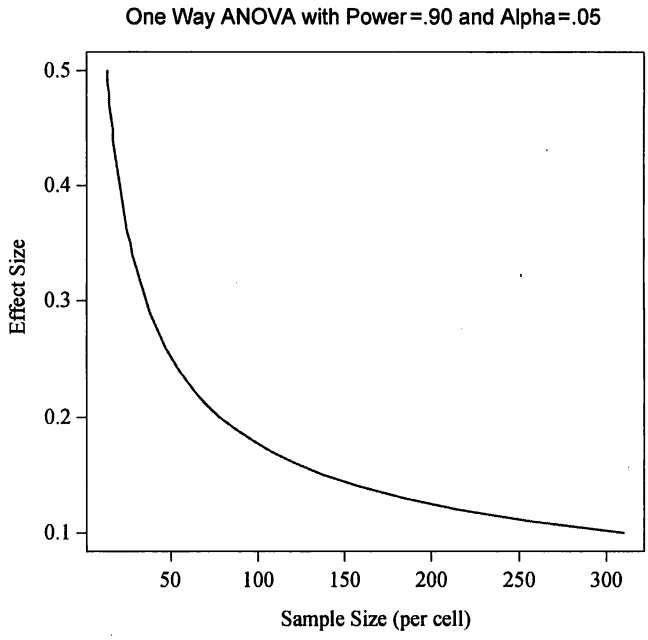


图10-2　五分组的单因素ANOVA中检测显著效应所需的样本大小（假定0.90的功效和0.05的显著性水平）

实验设计中，这样的图形有助于估计不同条件时的影响值。例如，从图形可以看到各组样本量高于200个观测时，再增加样本已经效果不大了。下一节我们将看看其他图形示例。

10.3　绘制功效分析图形

结束pwr包的探讨前，我们再学习一个涉及面更广的绘图示例。假设对于相关系数统计显著性的检验，你想计算一系列效应值和功效水平下所需的样本量，此时可用pwr.r.test()函数和for循环来完成任务，参见代码清单10-2。

代码清单10-2　检验各种效应值下的相关性所需的样本量曲线

```
library(pwr)
r <- seq(.1,.5,.01)
nr <- length(r)

p <- seq(.4,.9,.1)
np <- length(p)

samsize <- array(numeric(nr*np), dim=c(nr,np))
for (i in 1:np){
  for (j in 1:nr){
    result <- pwr.r.test(n = NULL, r = r[j],
    sig.level = .05, power = p[i],
```

❶ 生成一系列相关系数和功效值

❷ 获取样本大小

```
    alternative = "two.sided")
    samsize[j,i] <- ceiling(result$n)
  }
}

xrange <- range(r)                                  ◀—❸ 创建图形
yrange <- round(range(samsize))
colors <- rainbow(length(p))
plot(xrange, yrange, type="n",
     xlab="Correlation Coefficient (r)",
     ylab="Sample Size (n)" )

for (i in 1:np){                                    ◀—❹ 添加功效曲线
  lines(r, samsize[,i], type="l", lwd=2, col=colors[i])
}

abline(v=0, h=seq(0,yrange[2],50), lty=2, col="grey89")  ◀—❺ 添加注释
abline(h=0, v=seq(xrange[1],xrange[2],.02), lty=2,
       col="gray89")
title("Sample Size Estimation for Correlation Studies\n
      Sig=0.05 (Two-tailed)")
legend("topright", title="Power", as.character(p),
       fill=colors)
```

代码清单10-2使用seq函数来生成一系列的效应值r（H_1时的相关系数）和功效水平p❶。然后，利用两个for循环来循环读取这些效应值和功效水平，并计算相应所需的样本大小，将其存储在数组samsize中❷。随后，创建图形，设置合适的水平轴和垂直轴以及标签❸。使用曲线形式（lines）而不是点形式（points）来添加功效曲线❹。最后，添加网格和图例，以使图形易于理解❺。结果见图10-3。

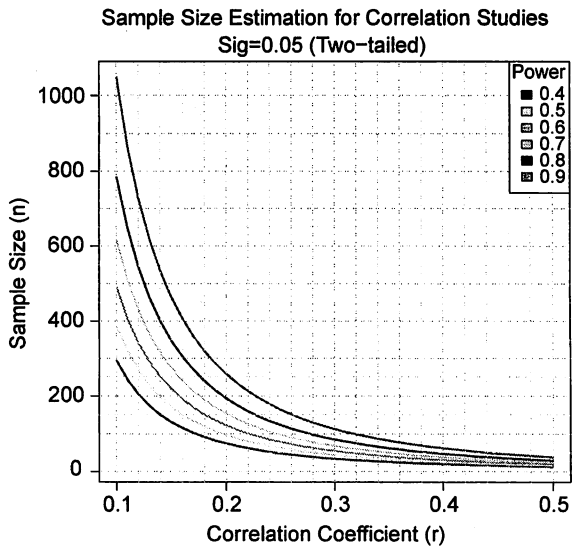


图10-3 在不同功效水平下检测到显著的相关性所需的样本量

从图10-3中可以看到，在40%的置信度下，要检测到0.20的相关性，需要约75的样本量。在90%的置信度下，要检测到相同的相关性，需要大约185个额外的观测（n=260）。做少许改动，这个方法便可以用来对许多统计检验创建样本量和功效的曲线图。

最后，让我们来看一下功效分析可能会用到的其他R函数。

10.4　其他软件包

对于研究的规划阶段，R还提供了不少其他有用的软件包。它们有的可能包含一般性的分析工具，而有的则可能是高度专业化的。

piface包（见图10-4）提供了一个与R交互的Java图形用户界面（GUI），包含各种计算样本量的方法。该GUI允许用户交互性地修改研究的参数，观察它们对其他参数的影响。

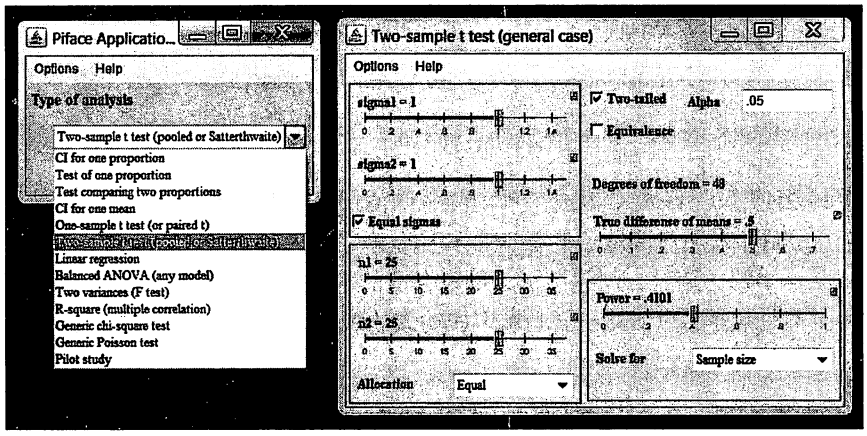


图10-4　piface项目的对话框示例

虽然该包仍在测试阶段，但是非常值得探究。在http://r-forge.r-project.org/projects/piface/上，可以下载piface包的源代码和供Windows和Mac OS X使用的二进制文件。在R中，输入代码：

```
install.packages("piface", repos="http://R-Forge.R-project.org")
library(piface)
piface()
```

该包在探索样本大小、效应值、显著性水平和预期功效水平的改变对其他参数的影响时非常有用。

表10-4列出了其他与功效分析有关的软件包。最后5个包聚焦于基因研究中的功效分析。识别基因与可观测特征的关联性的研究称为全基因组关联研究（GWAS）。例如，它们可能关注为什么一些人会得某种特殊类型的心脏病。

表10-4 专业化的功效分析软件包

软 件 包	目 的
asypow	通过渐进似然比方法计算功效
PwrGSD	组序列设计的功效分析
pamm	混合模型中随机效应的功效分析
powerSurvEpi	流行病研究的生存分析中功效和样本量的计算
powerpkg	患病同胞配对法和TDT（Transmission Disequilibrium Test，传送不均衡检验）设计的功效分析
powerGWASinteraction	GWAS交互作用的功效计算
pedantics	一些有助于种群基因研究功效分析的函数
gap	一些病例队列研究设计中计算功效和样本量的函数
ssize.fdr	微阵列实验中样本量的计算

最后，MBESS包也包含了可供各种形式功效分析所用的函数。这些函数主要供行为学、教育学和社会科学的研究者使用。

10.5 小结

在第7章、第8章和第9章，我们探索了各种各样的统计假设检验R函数。本章中，我们主要关注研究的筹备阶段。功效分析不仅可以帮助你判断在给定置信度和效应值的前提下所需的样本量，也能说明在给定样本量时检测到要求效应值的概率。对于限定误报效应显著性的可能性（I型错误）和正确检测真实效应（功效）的可能性的平衡，你也有了一个直观的了解。

本章主要内容是pwr包中函数的使用方法。这些函数可以对常见的统计方法（包括t检验、卡方检验、比例检验、ANOVA和回归）进行功效和样本量的计算。本章最后还介绍了一些专业化的功效分析方法。

典型的功效分析是一个交互性的过程。研究者会通过改变样本量、效应值、预期显著性水平和预期功效水平这些参数，来观测它们对于其他参数的影响。这些结果对于研究的筹备是非常有意义的。过去研究的信息（特别是效应值）可以帮助你在未来设计更有效和高效的研究。

功效分析的一个重要附加效益是引起方向性的转变，它鼓励不要仅仅关注于二值型（即效应存在还是不存在）的假设检验，而应该仔细思考效应值增加的意义。期刊编辑越来越多地要求作者在报告研究结果的时候既包含p值又包含效应值。因为它们不仅能够帮助你判断研究的实际意义，还能提供用于未来研究的信息。

下一章，我们将学习一些可视化多元关系的新方法。这些可视化的图形不仅能补充和加强到目前为止我们已经讨论过的分析方法，还能为你学习第三部分的高级方法做一些准备。

第11章 中级绘图

本章内容

- 二元变量和多元变量关系的可视化
- 绘制散点图和折线图
- 理解相关图
- 学习马赛克图和关联图

第6章（基本图形）中，我们学习了许多应用广泛的图形，它们主要用于展示单类别型或连续型变量的分布情况。第8章（回归）中，我们又回顾了一些用于通过一系列预测变量来预测连续型结果变量的实用图形方法。第9章（方差分析）中，我们学习了其他很有用的绘图技巧，用于展示连续型结果变量的组间差异。从各方面来看，本章将是对之前图形主题的延伸与扩展。

本章，我们主要关注用于展示双变量间关系（二元关系）和多变量间关系（多元关系）的绘图方法。比如下面的例子。

- 汽车里程与车重的关系是怎样的？它是否随着汽车的气缸数目不同而变化？
- 如何在一个图形中展示汽车里程、车重、排量和后轴比之间的关系？
- 当展示大数据集（如10 000个观测）中的两个变量的关系时，如何处理数据点严重重叠的情况？换句话说，当图形变成了一个大黑点时怎么办？
- 如何一次性展示三个变量间的多元关系（给你一个电脑屏幕或一张纸，并且预算没有《阿凡达》那么多）？
- 如何展示一些树随时间推移的生长情况？
- 如何在单幅图中展示一堆变量的相关性？它又如何帮助你理解数据的结构呢？
- 对于《泰坦尼克号》中幸存者的数据，如何可视化他们的船舱等级、性别和年龄间的关系？可以从这样的图形中得出什么样的结论？

以上这些问题都可以通过本章讲解的方法来解决。我们将尽量使用真实的数据集。不过，最重要的问题还是要掌握一般的绘图方法。如果你对汽车属性或树木生长的例子不感兴趣，可以使用自己的数据。

本章将首先从散点图和散点图矩阵讲起，然后探索各种各样的折线图。这些方法都非常

有名，在研究中有广泛的应用。接着，将回顾用于相关性可视化的相关图，以及用于类别型变量中多元关系可视化的马赛克图。这些方法也非常实用，不过了解这些方法的研究人员和数据分析师并不多。通过这些绘图方法的示例，你将能更好地理解数据，并将你的发现展示给其他人。

11.1 散点图

在之前各章中，我们了解到散点图可用来描述两个连续型变量间的关系。本节，我们首先描述一个二元变量关系（x对y），然后探究各种通过添加额外信息来增强图形表达功能的方法。接着，我们将学习如何把多个散点图组合起来形成一个散点图矩阵，以便可以同时浏览多个二元变量关系。我们还将回顾一些数据点重叠的特殊案例，由于重叠将会削弱图形描述数据的能力，所以我们将围绕该难点讨论多种解决途径。最后，通过添加第三个连续型变量，我们将把二维图形扩展到三维，包括三维散点图和气泡图。它们都可帮助你更好地迅速理解三变量间的多元关系。

R中创建散点图的基础函数是`plot(x, y)`，其中，x和y是数值型向量，代表着图形中的(x,y)点。代码清单11-1展示了一个例子。

代码清单11-1 添加了最佳拟合曲线的散点图

```
attach(mtcars)
plot(wt, mpg,
     main="Basic Scatter plot of MPG vs. Weight",
     xlab="Car Weight (lbs/1000)",
     ylab="Miles Per Gallon ", pch=19)

abline(lm(mpg~wt), col="red", lwd=2, lty=1)

lines(lowess(wt,mpg), col="blue", lwd=2, lty=2)
```

图形结果参见图11-1。

代码清单11-1中的代码加载了`mtcars`数据框，创建了一幅基本的散点图，图形的符号[①]是实心圆圈。与预期结果相同，随着车重的增加，每加仑英里数减少，虽然它们不是完美的线性关系。`abline()`函数用来添加最佳拟合的线性直线，而`lowess()`函数则用来添加一条平滑曲线。该平滑曲线拟合是一种基于局部加权多项式回归的非参数方法。算法细节可参见Cleveland(1981)。

注意 R有两个平滑曲线拟合函数：`lowess()`和`loess()`。`loess()`是基于`lowess()`表达式版本的更新和更强大的拟合函数。这两个函数的默认值不同，因此要小心使用，不要把它们弄混淆了。

① 即指`plot()`函数中的pch参数。——译者注

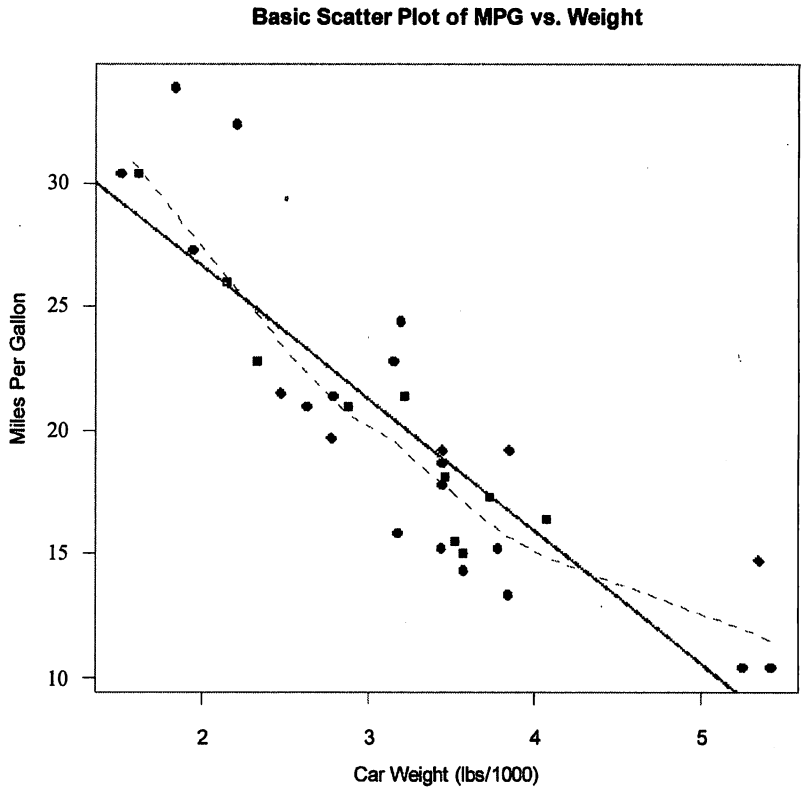


图11-1　汽车英里数对车重的散点图，添加了线性拟合直线和lowess拟合曲线

car包中的scatterplot()函数增强了散点图的许多功能，它可以很方便地绘制散点图，并能添加拟合曲线、边界箱线图和置信椭圆，还可以按子集绘图和交互式地识别点。例如，以下代码可生成一个比之前图形更复杂的版本：

```
library(car)
scatterplot(mpg ~ wt | cyl, data=mtcars, lwd=2,
            main="Scatter Plot of MPG vs. Weight by # Cylinders",
            xlab="Weight of Car (lbs/1000)",
            ylab="Miles Per Gallon",
            legend.plot=TRUE,
            id.method="identify",
            labels=row.names(mtcars),
            boxplots="xy"
)
```

此处，scatterplot()函数用来绘制有四个、六个和八个气缸的汽车每加仑英里数对车重的图形。表达式mpg ~ wt | cyl表示按条件绘图（即按cyl的水平分别绘制mpg和wt的关系图）。结果见图11-2。

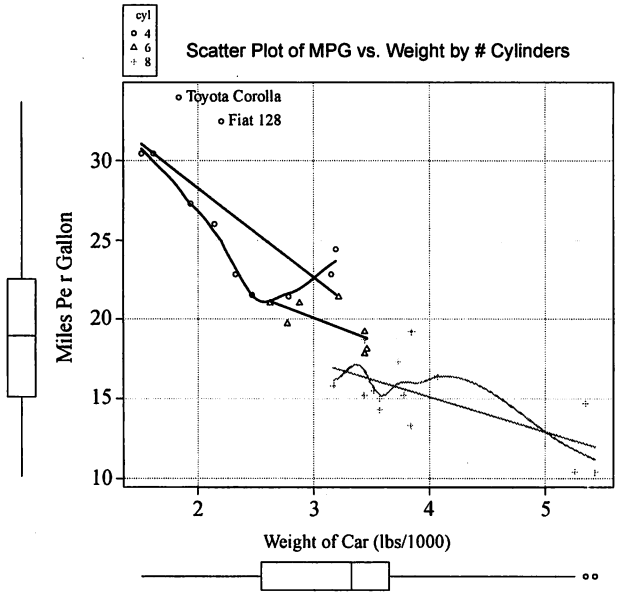


图11-2 各子集的散点图与其相应的拟合曲线

默认地，各子集会通过颜色和图形符号加以区分，并同时绘制线性拟合和平滑拟合曲线。平滑拟合默认需要五个单独的数据点，因此六缸车型的平滑曲线无法绘制。`id.method`选项的设定表明可通过鼠标单击来交互式地识别数据点，直到用户选择Stop（通过图形或者背景菜单）或者敲击Esc键。`labels`选项的设定表明可通过点的行名称来识别点。此图中可以看到，给定Toyata Corolla和Fiat 128的车重，通常每加仑燃油可行驶得更远。`legend.plot`选项表明在左上边界添加图例，而`mpg`和`weight`的边界箱线图可通过`boxplots`选项来绘制。总之，`scatterplot()`函数还有许多特性值得探究，比如本节未讨论的稳健性选项和数据集中度椭圆选项。更多细节可参见`help(scatterplot)`。

散点图可以一次对两个定量变量间的关系进行可视化。但是如果想观察下汽车里程、车重、排量（立方英寸）和后轴比间的二元关系，该怎么做呢？一种途径就是将六幅散点图绘制到一个矩阵中，这便是下节即将介绍的散点图矩阵。

11.1.1 散点图矩阵

R中至少有四种创建散点图矩阵的实用函数。相信数据分析师一定很喜爱散点图矩阵吧？`pairs()`函数可以创建基础的散点图矩阵。下面的代码生成了一个散点图矩阵，包含`mpg`、`disp`、`drat`和`wt`四个变量：

```
pairs(~mpg+disp+drat+wt, data=mtcars,
      main="Basic Scatter Plot Matrix")
```

图中包含~右边的所有变量，参见图11-3。

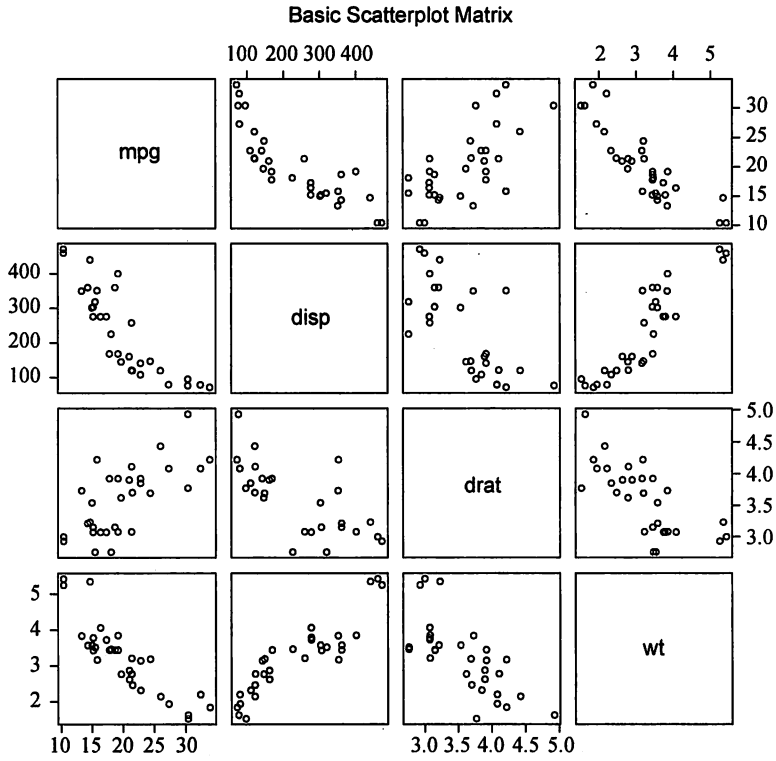


图11-3　pairs()函数创建的散点图矩阵

在图11-3中，你可以看到所有指定变量间的二元关系。例如，mpg和disp的散点图可在两变量的行列交叉处找到。值得注意的是，主对角线的上方和下方的六幅散点图是相同的，这也是为了方便摆放图形的缘故。通过调整参数，可以只展示下三角或者上三角的图形。例如，选项upper.panel = NULL将只生成下三角的图形。

car包中的scatterplotMatrix()函数也可以生成散点图矩阵，并有以下可选操作：

- 以某个因子为条件绘制散点图矩阵；
- 包含线性和平滑拟合曲线；
- 在主对角线放置箱线图、密度图或者直方图；
- 在各单元格的边界添加轴须图。

例如：

```
library(car)
scatterplotMatrix(~ mpg + disp + drat + wt, data=mtcars, spread=FALSE,
                  lty.smooth=2, main="Scatter Plot Matrix via car Package")
```

结果见图11-4。可以看到线性和平滑（loess）拟合曲线被默认添加，主对角线处添加了核密度曲线和轴须图。spread = FALSE选项表示不添加展示分散度和对称信息的直线，lty.smooth = 2设定平滑（loess）拟合曲线使用虚线而不是实线。

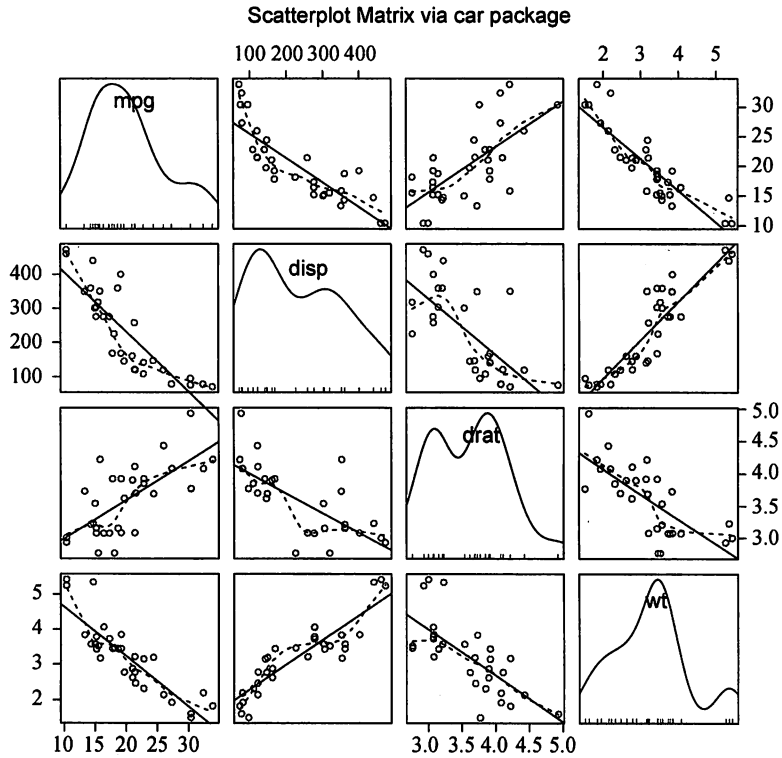


图11-4 scatterplotMatrix()函数创建的散点图矩阵。主对角线上有核密度曲线和轴须图，其余图形都含有线性和平滑拟合曲线

下面的代码展示了scatterplotMatrix()函数的另一个使用示例：

```
library(car)
scatterplotMatrix(~ mpg + disp + drat + wt | cyl, data=mtcars,
                  spread=FALSE, diagonal="histogram",
                  main="Scatter Plot Matrix via car Package")
```

这里，我们将主对角线的核密度曲线改成了直方图，并且直方图是以各车的气缸数为条件绘制的。结果见图11-5。

默认地，回归直线拟合整个样本，包含选项by.groups = TRUE将可依据各子集分别生成拟合曲线。

gclus包中的cpairs()函数提供了一个有趣的散点图矩阵变种。它含有可以重排矩阵中变量位置的选项，可以让相关性更高的变量更靠近主对角线。该函数还能对各单元格进行颜色编码来展示变量间的相关性大小。下面考虑mpg、wt、disp和drat间的相关性：

```
> cor(mtcars[c("mpg", "wt", "disp", "drat")])

        mpg     wt   disp   drat
mpg   1.000 -0.868 -0.848  0.681
```

```
wt   -0.868  1.000  0.888 -0.712
disp -0.848  0.888  1.000 -0.710
drat  0.681 -0.712 -0.710  1.000
```

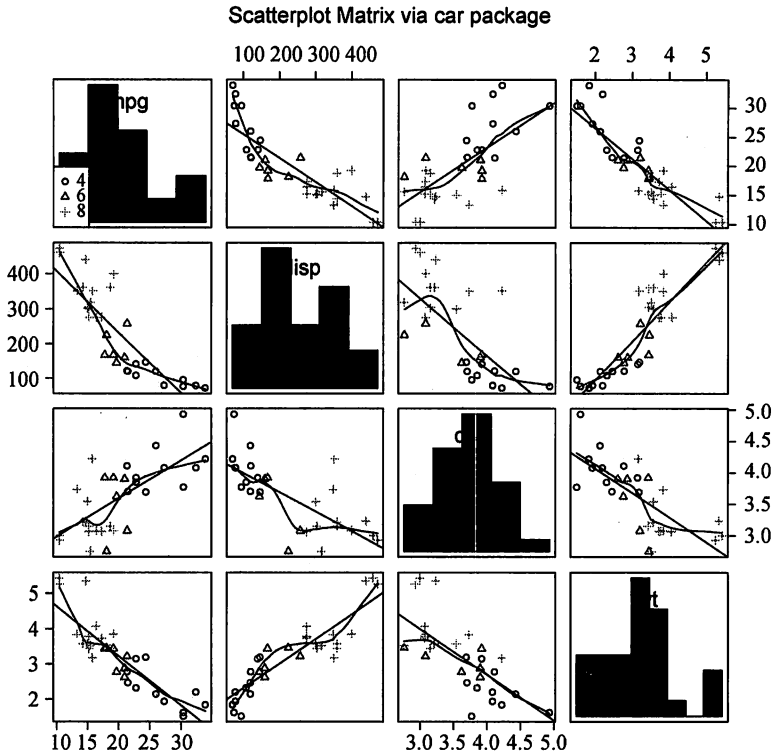


图11-5　scatterplotMatrix()函数生成的散点图矩阵。图形包含主对角线中的直方图以及其他部分的线性和平滑拟合曲线。另外，子群（根据气缸数）通过符号类型和颜色来区分标注

可以看到相关性最高（0.89）的是车重（wt）与排量（disp），以及车重（wt）与每加仑英里数（mpg；–0.87）。相关性最低（0.68）的是每加仑英里（mpg）与后轴比（drat）。参照代码清单11-2，你可以对散点图矩阵中的这些变量重新排序并添加颜色。

代码清单11-2　gclus包生成的散点图矩阵

```
library(gclus)
mydata <- mtcars[c(1, 3, 5, 6)]
mydata.corr <- abs(cor(mydata))

mycolors <- dmat.color(mydata.corr)

myorder <- order.single(mydata.corr)

cpairs(mydata,
```

```
        myorder,
        panel.colors=mycolors,
        gap=.5,
        main="Variables Ordered and Colored by Correlation"
)
```

代码清单11-2中使用的dmat.color()、order.single()和cpairs()函数都来自于gclus包。第一步，从mtcars数据框中选择所需的变量，并计算它们相关系数的绝对值。第二步，使用dmat.color()函数获取绘图的颜色。给定一个对称矩阵（本例中是相关系数矩阵），dmat.color()将返回一个颜色矩阵。第三步，可对图中变量进行排序。通过order.single()函数重排对象，可使得相似的对象更为靠近。本例中变量排序的基础是相关系数的相似性。最后，散点图矩阵将根据新的变量顺序（myorder）和颜色列表（mycolors）绘图、上色，gap选项使矩阵各单元格间的间距稍微增大一点。结果图形见图11-6。

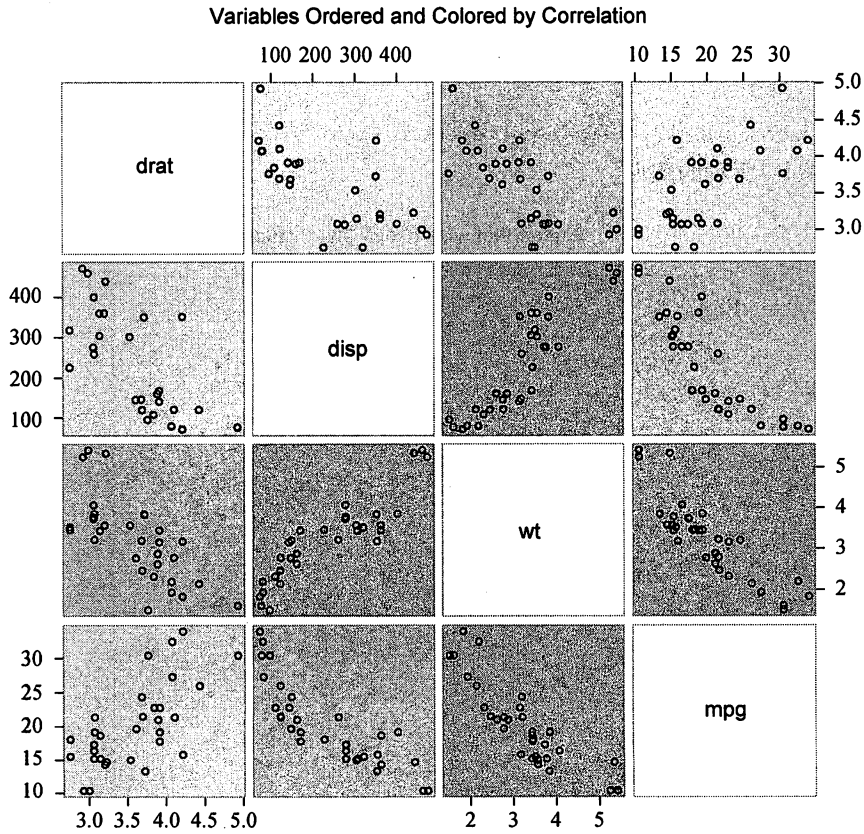


图11-6 gclus包中的cpairs()函数生成的散点图矩阵。变量离主对角线越近，相关性越高（另见彩插图11-6）

从图11-6中可以看到，相关性最高的变量对是车重与排量，以及每加仑英里数与车重（标了红色，并且离主对角线最近）。相关性最低的是后轴比与每加仑英里数（标了黄色，并且离主对

角线很远）。当变量数众多，变量间的相关性变化很大时，该方法特别有用。在第16章，你还将会看到其他散点图矩阵的例子。

11.1.2　高密度散点图

当数据点重叠很严重时，用散点图来观察变量关系就显得“力不从心”了。下面是一个人为设计的例子，其中10 000个观测点分布在两个重叠的数据群中：

```
set.seed(1234)

n <- 10000
c1 <- matrix(rnorm(n, mean=0, sd=.5), ncol=2)
c2 <- matrix(rnorm(n, mean=3, sd=2), ncol=2)
mydata <- rbind(c1, c2)
mydata <- as.data.frame(mydata)
names(mydata) <- c("x", "y")
```

若用下面的代码生成一幅标准的散点图：

```
with(mydata,
     plot(x, y, pch=19, main="Scatter Plot with 10,000 Observations"))
```

你将会得到如图11-7所示的图形。

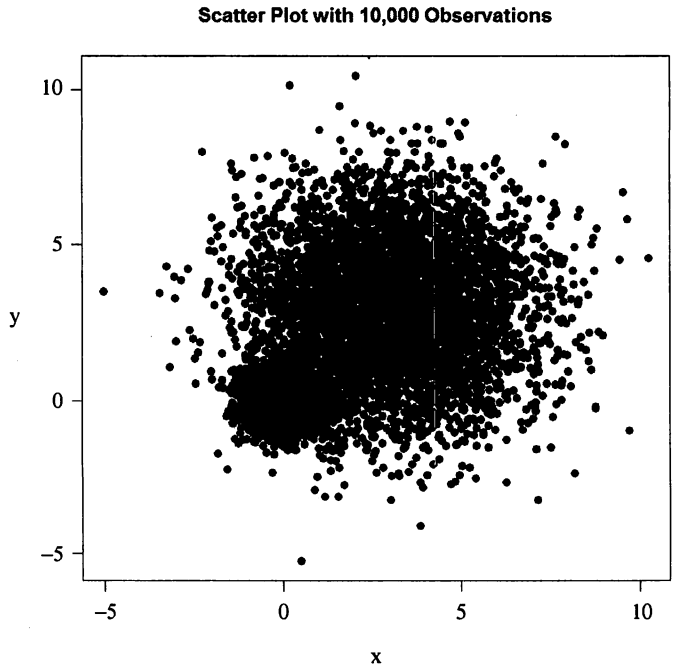


图11-7　10 000个观测点的散点图，严重的重叠导致很难识别哪里数据点的密度最大

图11-7中，数据点的重叠导致识别x与y间的关系变得异常困难。针对这种情况，R提供了一

些解决办法。你可以使用封箱、颜色和透明度来指明图中任意点上重叠点的数目。

smoothScatter()函数可利用核密度估计生成用颜色密度来表示点分布的散点图。代码如下：

```
with(mydata,
     smoothScatter(x, y, main="Scatterplot Colored by Smoothed Densities"))
```

生成图形见图11-8。

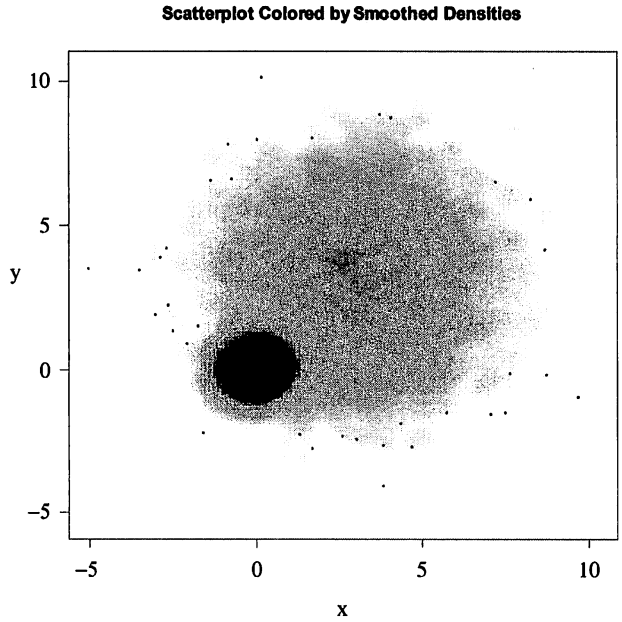


图11-8 smoothScatter()利用光平滑密度估计绘制的散点图。此处密度易读性更强

与上面的方法不同，hexbin包中的hexbin()函数将二元变量的封箱放到六边形单元格中（图形比名称更直观）。示例如下：

```
library(hexbin)
with(mydata, {
     bin <- hexbin(x, y, xbins=50)
     plot(bin, main="Hexagonal Binning with 10,000 Observations")
     })
```

你将得到如图11-9所示的散点图。

最后，IDPmisc包中的iplot()函数也可通过颜色来展示点的密度（在某特定点上数据点的数目）。代码如下：

```
library(IDPmisc)
with(mydata,
     iplot(x, y, main="Image Scatter Plot with Color Indicating Density"))
```

生成图形见图11-10。

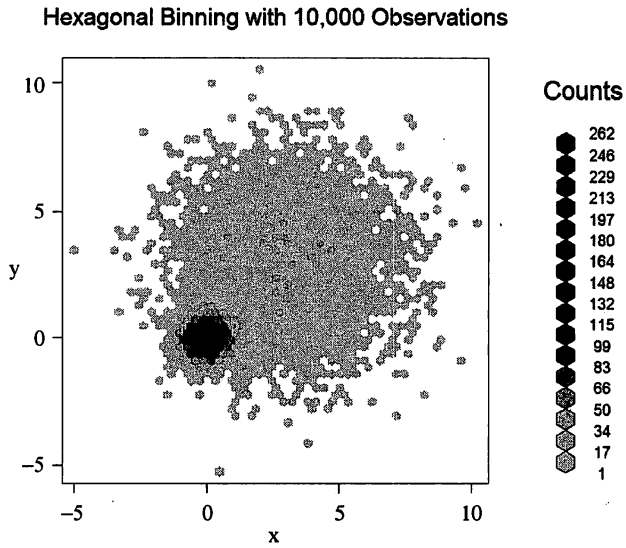


图11-9　用六边形封箱图展示的各点上覆盖观测点数目的散点图。通过图例，数据的集中度很容易计算和观察

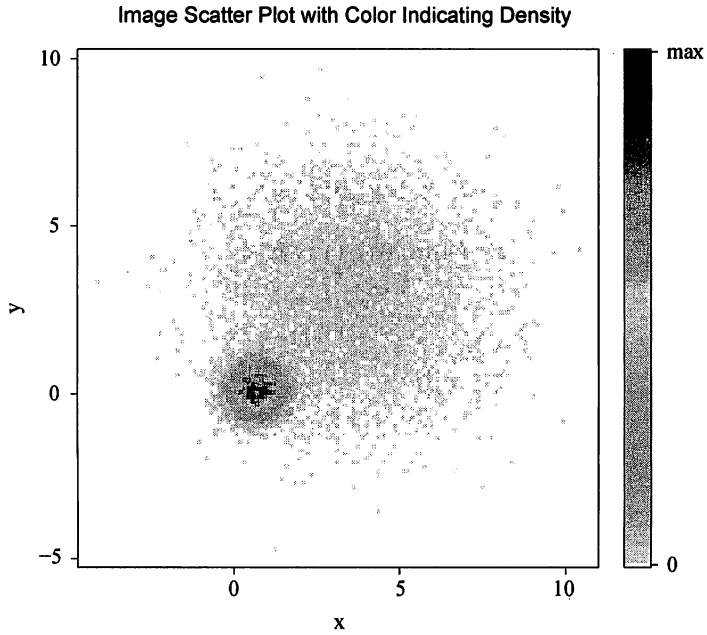


图11-10　含10 000个观测的散点图，其中密度通过颜色标识。数据集中度很容易辨识

综上可见，基础包中的`smoothScatter()`函数，以及`IDPmisc`包中的`ipairs()`函数都可以对大数据集创建可读性较好的散点图矩阵。通过`?smoothScatter`和`?ipairs`可获得更多的示例。

11.1.3 三维散点图

散点图和散点图矩阵展示的都是二元变量关系。倘若你想一次对三个定量变量的交互关系进行可视化呢？本节例子中，你可以使用三维散点图。

例如，假使你对汽车英里数、车重和排量间的关系感兴趣，可用scatterplot3d中的scatterplot3d()函数来绘制它们的关系。格式如下：

```
scatterplot3d(x, y, z)
```

*x*被绘制在水平轴上，*y*被绘制在竖直轴上，*z*被绘制在透视轴上。继续我们的例子：

```
library(scatterplot3d)
attach(mtcars)
scatterplot3d(wt, disp, mpg,
    main="Basic 3D Scatter Plot")
```

生成一幅三维散点图，见图11-11。

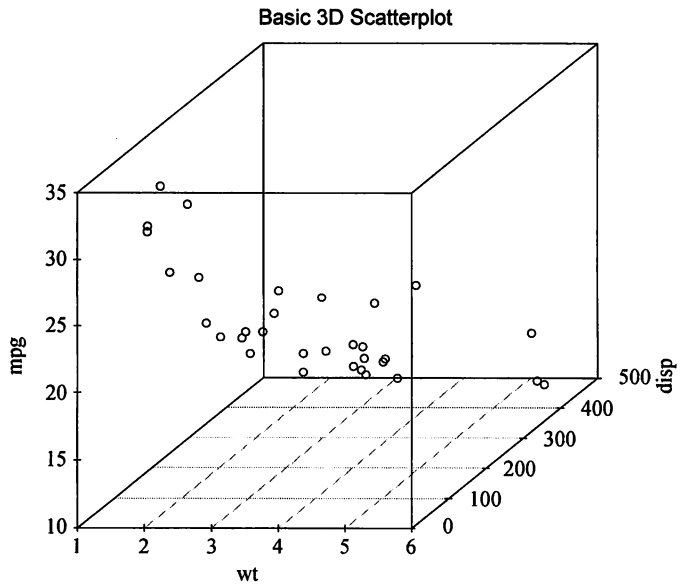


图11-11 每加仑英里数、车重和排量的三维散点图

satterplot3d()函数提供了许多选项，包括设置图形符号、轴、颜色、线条、网格线、突出显示和角度等功能。例如代码：

```
library(scatterplot3d)
attach(mtcars)
scatterplot3d(wt, disp, mpg,
              pch=16,
              highlight.3d=TRUE,
              type="h",
              main="3D Scatter Plot with Vertical Lines")
```

生成一幅突出显示效果的三维散点图，增强了纵深感，添加了连接点与水平面的垂直线（见图11-12）。

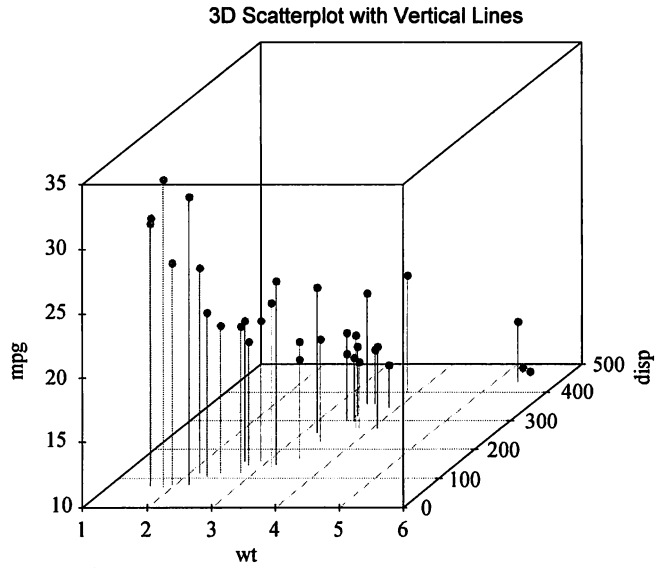


图11-12　添加了垂直线和阴影的三维散点图（另见彩插图11-12）

作为最后一个例子，我们在刚才那幅图上添加一个回归面。所需代码为：

```
library(scatterplot3d)
attach(mtcars)
s3d <-scatterplot3d(wt, disp, mpg,
      pch=16,
      highlight.3d=TRUE,
      type="h",
      main="3D Scatter Plot with Vertical Lines and Regression Plane")
fit <- lm(mpg ~ wt+disp)
s3d$plane3d(fit)
```

结果见图11-13。

图形利用多元回归方程，对通过车重和排量预测每加仑英里数进行了可视化处理。平面代表预测值，图中的点是实际值。平面到点的垂直距离表示残差值。若点在平面之上则表明它的预测值被低估了，而点在平面之下则表明它的预测值被高估了。多元回归内容见第8章。

旋转三维散点图

如果你能对三维散点图进行交互式操作，那么图形将会更好解释。R提供了一些旋转图形的功能，让你可以从多个角度观测绘制的数据点。

例如，你可用rgl包中的plot3d()函数创建可交互的三维散点图。你能通过鼠标对图形进行旋转。函数格式为：

```
plot3d(x, y, z)
```

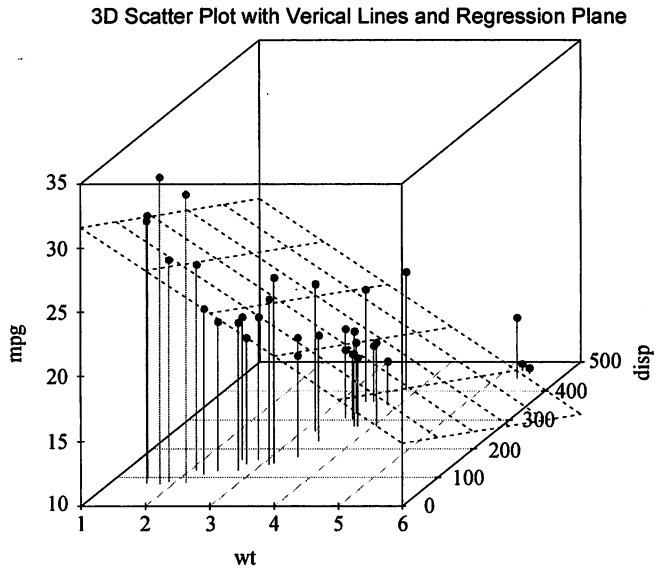


图11-13 添加了垂直线、阴影和回归平面的三维散点图

其中x、y和z是数值型向量，代表着各个点。你还可以添加如col和size这类的选项来分别控制点的颜色和大小。继续上面的例子，使用代码：

```
library(rgl)
attach(mtcars)
plot3d(wt, disp, mpg, col="red", size=5)
```

你可获得如图11-14所示的图形。通过鼠标旋转坐标轴，你会发现三维散点图的旋转能使你更轻松地理解图形。

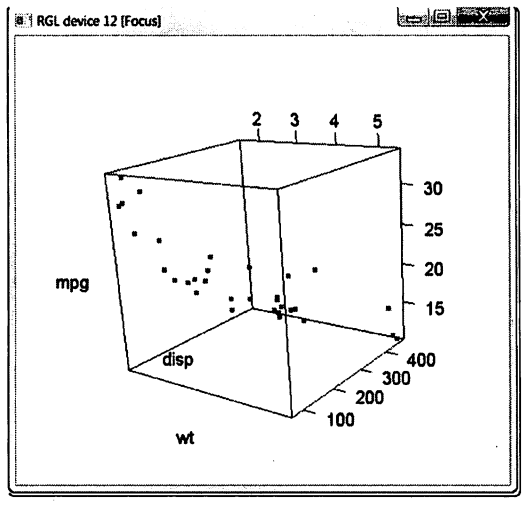


图11-14 rgl包中的plot3d()函数生成的旋转三维散点图

你也可以使用Rcmdr包中类似的函数scatter3d()：

```
library(Rcmdr)
attach(mtcars)
scatter3d(wt, disp, mpg)
```

结果图形见图11-15。

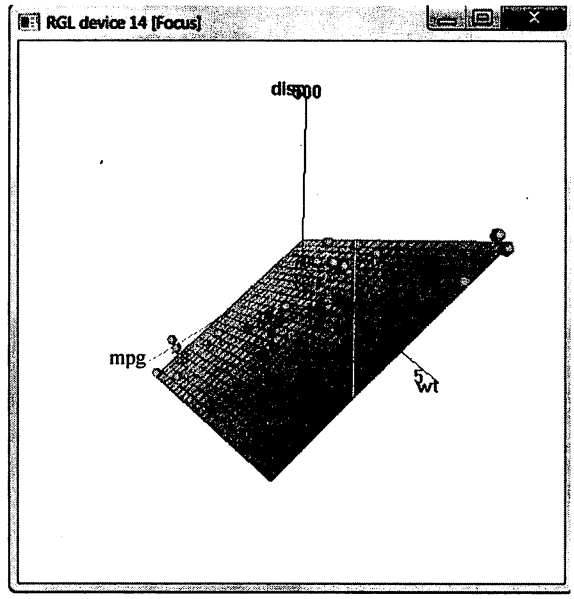


图11-15　Rcmdr包中的scatter3d()生成的旋转三维散点图

scatter3d()函数可包含各种回归曲面，比如线性、二次、平滑和附加等类型。图形默认添加线性平面。另外，函数中还有可用于交互式识别点的选项。通过help(scatter3d)可获得函数的更多细节。在附录A中，我将对Rcmdr包做更详细的介绍。

11.1.4　气泡图

在之前的章节中，我们通过三维散点图来展示三个定量变量间的关系。现在介绍另外一种思路：先创建一个二维散点图，然后用点的大小来代表第三个变量的值。这便是气泡图（bubble plot）。

你可用symbols()函数来创建气泡图。该函数可以在指定的(*x*, *y*)坐标上绘制圆圈图、方形图、星形图、温度计图和箱线图。以绘制圆圈图为例：

```
symbols(x, y, circle=radius)
```

其中*x*、*y*和*radius*是需要设定的向量，分别表示*x*、*y*坐标和圆圈半径。

你可能想用面积而不是半径来表示第三个变量，那么按照圆圈半径的公式（$r = \sqrt{A/\pi}$）变换即可：

```
symbols(x, y, circle=sqrt(z/pi))
```

z即第三个要绘制的变量。

现在我们把该方法应用到mtcars数据集上，x轴代表车重，y轴代表每加仑英里数，气泡大小代表发动机排量。代码如下：

```
attach(mtcars)
r <- sqrt(disp/pi)
symbols(wt, mpg, circle=r, inches=0.30,
        fg="white", bg="lightblue",
        main="Bubble Plot with point size proportional to displacement",
        ylab="Miles Per Gallon",
        xlab="Weight of Car (lbs/1000)")
text(wt, mpg, rownames(mtcars), cex=0.6)
detach(mtcars)
```

生成图形见图11-16。选项inches是比例因子，控制着圆圈大小（默认最大圆圈为1英寸）。text()函数是可选函数，此处用来添加各个汽车的名称。从图中可以看到，随着每加仑汽油所行驶里程的增加，车重和发动机排量都逐渐减少。

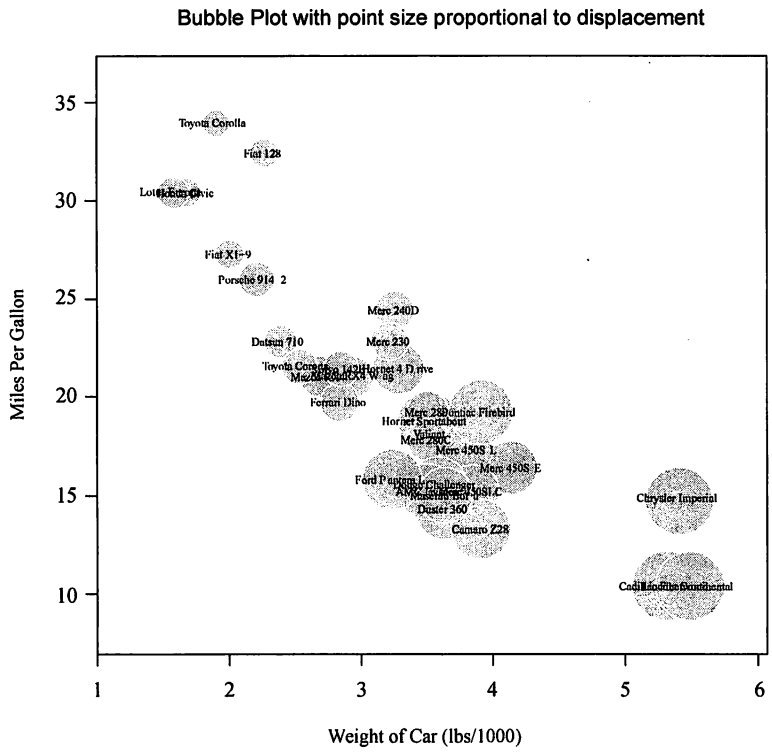


图11-16 车重与每加仑英里数的气泡图，点大小与发动机排量成正比

一般来说，统计人员使用R时都倾向于避免用气泡图，原因和避免使用饼图一样：相比对长度的判断，人们对体积/面积的判断通常更困难。但是气泡图在商业应用中非常受欢迎，因此我还是将其包含在了本章里。

对于散点图，我已经介绍非常多了，之所以论述这么多的细节，主要是因为它在数据分析中占据着非常重要的位置。虽然散点图很简单，但是它们能帮你以最直接的方式展示数据，发现隐藏着的可能会被忽略的关系。

11.2　折线图

如果将散点图上的点从左往右连接起来，那么就会得到一个折线图。以基础安装中的Orange数据集为例，它包含五种橘树的树龄和年轮数据。现要考察第一种橘树的生长情况，绘制图形11-17。左图为散点图，右图为折线图。可以看到，折线图是一个刻画变动的优秀工具。

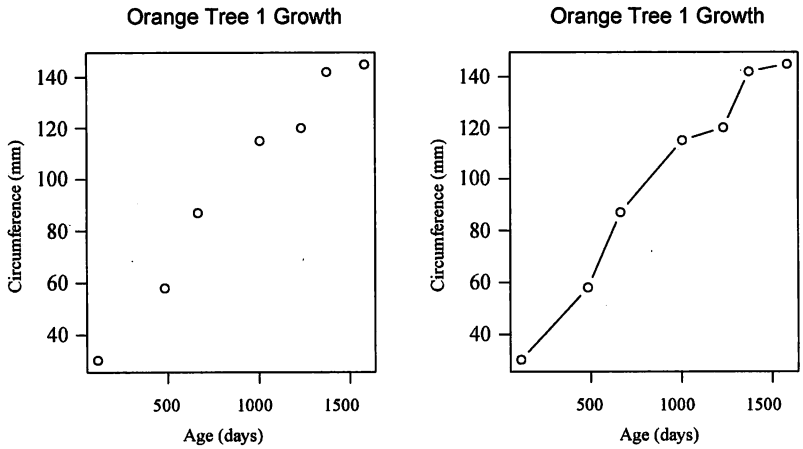


图11-17　散点图与折线图的对比

图11-17是由代码清单11-3中的代码创建的。

代码清单11-3　创建散点图和折线图

```
opar <- par(no.readonly=TRUE)
par(mfrow=c(1,2))
t1 <- subset(Orange, Tree==1)
plot(t1$age, t1$circumference,
     xlab="Age (days)",
     ylab="Circumference (mm)",
     main="Orange Tree 1 Growth")
plot(t1$age, t1$circumference,
     xlab="Age (days)",
     ylab="Circumference (mm)",
     main="Orange Tree 1 Growth",
     type="b")
par(opar)
```

在第3章中，代码中的基本参数你都已经见过，因此此处不做过多讲解。图11-17中两幅图的主要区别取决于参数type = "b"。折线图一般可用下列两个函数之一来创建：

```
plot(x, y, type=)
lines(x, y, type=)
```

其中，x和y是要连接的(x, y)点的数值型向量。参数type =的可选值见表11-1。

表11-1 折线图类型

类 型	图形外观
p	只有点
l	只有线
o	实心点和线（即线覆盖在点上）
b、c	线连接点（c时不绘制点）
s、S	阶梯线
h	直方图式的垂直线
n	不生成任何点和线（通常用来为后面的命令创建坐标轴）

图11-18给出了各类型的示例。可以看到，type = "p"生成了典型的散点图，type = "b"是最常见的折线图。b和c间的不同之处即点是否出现或者线之间是否有空隙。type ="s"和type = "S"都生成阶梯线（阶梯函数），但一种类型是先横着画线，然后再上升，而第二种类型是先上升，再横着画线。

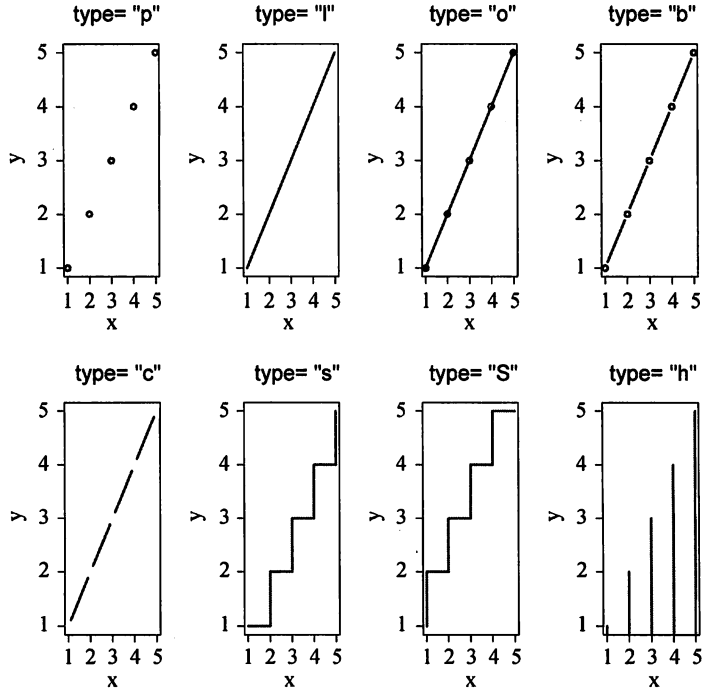


图11-18 plot()和lines()函数中的type参数值

注意，plot()和lines()函数工作原理并不相同。plot()函数是被调用时即创建一幅新图，而lines()函数则是在已存在的图形上添加信息，并不能自己生成图形。

因此，lines()函数通常是在plot()函数生成一幅图形后再被调用。如果对图形有要求，你可以先通过plot()函数中的type = n来创建坐标轴、标题和其他图形特征，然后再使用lines()函数添加各种需要绘制的曲线。

我们以绘制五种橘树随时间推移的生长状况为例，逐步展示一个更复杂折线图的创建过程。每种树都有自己独有的线条。代码见代码清单11-4，结果见图11-19。

代码清单11-4　展示五种橘树随时间推移的生长状况的折线图

```
Orange$Tree <- as.numeric(Orange$Tree)
ntrees <- max(Orange$Tree)

xrange <- range(Orange$age)
yrange <- range(Orange$circumference)

plot(xrange, yrange,
     type="n",
     xlab="Age (days)",
     ylab="Circumference (mm)"
 )

colors <- rainbow(ntrees)
linetype <- c(1:ntrees)
plotchar <- seq(18, 18+ntrees, 1)

for (i in 1:ntrees) {
    tree <- subset(Orange, Tree==i)
    lines(tree$age, tree$circumference,
          type="b",
          lwd=2,
          lty=linetype[i],
          col=colors[i],
          pch=plotchar[i]
    )
}

title("Tree Growth", "example of line plot")

legend(xrange[1], yrange[2],
       1:ntrees,
       cex=0.8,
       col=colors,
       pch=plotchar,
       lty=linetype,
       title="Tree"
)
```

为方便起见，将因子转化为数值型

创建图形

添加线条

添加图例

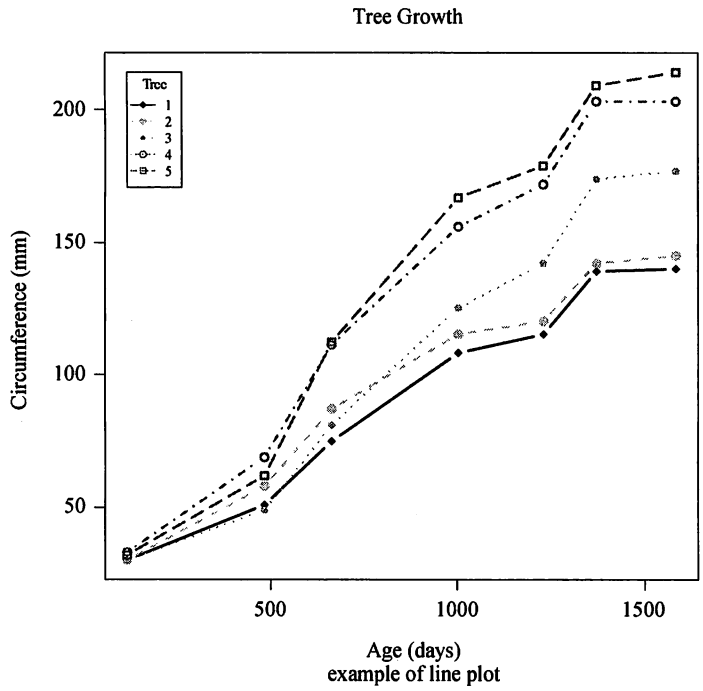


图11-19 展示五种橘树生长状况的折线图（另见彩插图11-19）

在代码清单11-4中，`plot()`函数先用来创建空图形，只设定了轴标签和轴范围，并没有绘制任何数据点，每种橘树独有的折线和点都是随后通过`lines()`函数来添加。可以看到，Tree 4和Tree 5在整个时间段中一直保持着最快的生长速度，而且Tree 5在大约664天的时候超过了Tree 4。

代码清单11-4使用了许多R中的编程惯例，这些惯例在第2章、第3章和第4章都已讨论过。通过亲手一行一行地敲入代码，观察可视化结果，你可以检验是否对这些惯例有了深刻的理解。如果答案是肯定的，那么恭喜你，你正在成为严肃的R程序员（声名和机遇都唾手可得了）!在下一节中，我们将会探索各种同时检验多个相关系数的方法。

11.3 相关图

相关系数矩阵是多元统计分析的一个基本方面。哪些被考察的变量与其他变量相关性很强，而哪些并不强？相关变量是否以某种特定的方式聚集在一起？随着变量数的增加，这类问题将变得更难回答。相关图作为一种相对现代的方法，可通过对相关系数矩阵的可视化来回答这些问题。

相关图非常容易解释，你只要看到它就会立马明白。以`mtcars`数据框中的变量相关性为例，它含有11个变量，对每个变量都测量了32辆汽车。利用下面的代码，你可以获得该数据的相关系数：

```
> options(digits=2)
> cor(mtcars)
       mpg   cyl  disp    hp   drat    wt   qsec    vs     am  gear   carb
mpg   1.00 -0.85 -0.85 -0.78  0.681 -0.87  0.419  0.66  0.600  0.48 -0.551
cyl  -0.85  1.00  0.90  0.83 -0.700  0.78 -0.591 -0.81 -0.523 -0.49  0.527
disp -0.85  0.90  1.00  0.79 -0.710  0.89 -0.434 -0.71 -0.591 -0.56  0.395
hp   -0.78  0.83  0.79  1.00 -0.449  0.66 -0.708 -0.72 -0.243 -0.13  0.750
drat  0.68 -0.70 -0.71 -0.45  1.000 -0.71  0.091  0.44  0.713  0.70 -0.091
wt   -0.87  0.78  0.89  0.66 -0.712  1.00 -0.175 -0.55 -0.692 -0.58  0.428
qsec  0.42 -0.59 -0.43 -0.71  0.091 -0.17  1.000  0.74 -0.230 -0.21 -0.656
vs    0.66 -0.81 -0.71 -0.72  0.440 -0.55  0.745  1.00  0.168  0.21 -0.570
am    0.60 -0.52 -0.59 -0.24  0.713 -0.69 -0.230  0.17  1.000  0.79  0.058
gear  0.48 -0.49 -0.56 -0.13  0.700 -0.58 -0.213  0.21  0.794  1.00  0.274
carb -0.55  0.53  0.39  0.75 -0.091  0.43 -0.656 -0.57  0.058  0.27  1.000
```

哪些变量相关性最强？哪些变量相对独立？是否存在某种聚集模式？如果不花点时间和精力（可能还需要用些彩笔做些注释），单利用这个相关系数矩阵来回答这些问题是比较困难的。

利用corrgram包中的corrgram()函数，你可以以图形方式展示该相关系数矩阵（见图11-20）。代码为：

```
library(corrgram)
corrgram(mtcars, order=TRUE, lower.panel=panel.shade,
         upper.panel=panel.pie, text.panel=panel.txt,
         main="Correlogram of mtcars intercorrelations")
```

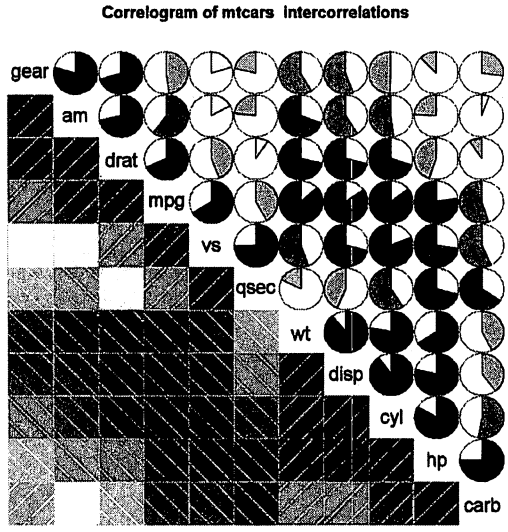


图11-20　mtcars数据框中变量的相关系数图。矩阵行和列都通过主成分分析法进行了重新排序（另见彩插图11-20）

我们先从下三角单元格（在主对角线下方的单元格）开始解释这幅图形。默认地，蓝色和从左下指向右上的斜杠表示单元格中的两个变量呈正相关。反过来，红色和从左上指向右下的斜杠表示变量呈负相关。色彩越深，饱和度越高，说明变量相关性越大。相关性接近于0的单元格基

本无色。本图为了将有相似相关模式的变量聚集在一起，对矩阵的行和列都重新进行了排序（使用主成分法）。

从图中含阴影的单元格中可以看到，gear、am、drat和mpg相互间呈正相关，wt、disp、hp和carb相互间也呈正相关。但第一组变量与第二组变量呈负相关。你还可以看到carb和am、vs和gear、vs和am以及drat和qsec四组变量间的相关性很弱。

上三角单元格用饼图展示了相同的信息。颜色的功能同上，但相关性大小由被填充的饼图块的大小来展示。正相关性将从12点钟处开始顺时针填充饼图，而负相关性则逆时针方向填充饼图。corrgram()函数的格式如下：

```
corrgram(x, order=, panel=, text.panel=, diag.panel=)
```

其中，x是一行一个观测的数据框。当order = TRUE时，相关矩阵将使用主成分分析法对变量重排序，这将使得二元变量的关系模式更为明显。

选项panel设定非对角线面板使用的元素类型。你可以通过选项lower.panel和upper.panel来分别设置主对角线下方和上方的元素类型。而text.panel和diag.panel选项控制着主对角线元素类型。可用的panel值见表11-2。

表11-2 corrgram()函数的panel选项

位　置	面板选项	描　述
非对角线	panel.pie panel.shade panel.ellipse panel.pts	用饼图的填充比例来表示相关性大小用阴影的深度来表示相关性大小绘制置信椭圆和平滑拟合曲线绘制散点图
主对角线	panel.minmax panel.txt	输出变量的最大最小值输出的变量名字

让我们尝试第二个例子。代码如下：

```
library(corrgram)
corrgram(mtcars, order=TRUE, lower.panel=panel.ellipse,
         upper.panel=panel.pts, text.panel=panel.txt,
         diag.panel=panel.minmax,
         main="Correlogram of mtcars data using scatter plots and ellipses")
```

生成的图形见图11-21。此处，我们在下三角区域使用平滑拟合曲线和置信椭圆，上三角区域使用散点图。

为何散点图看起来怪怪的？

图11-21中绘制的散点图限制了一些变量的可用值。例如，挡位数须取3、4或5，气缸数须取4、6或者8。am（传动类型）和vs（V/S）都是二值型。因此上三角区域的散点图看起来很奇怪。

为数据选择合适的统计方法时，你一定要保持谨慎的心态。指定变量是有序因子还是无序因子可以为之提供有用的诊断。当R知道变量是类别型还是有序型时，它会使用适合于当前测量水平的统计方法。

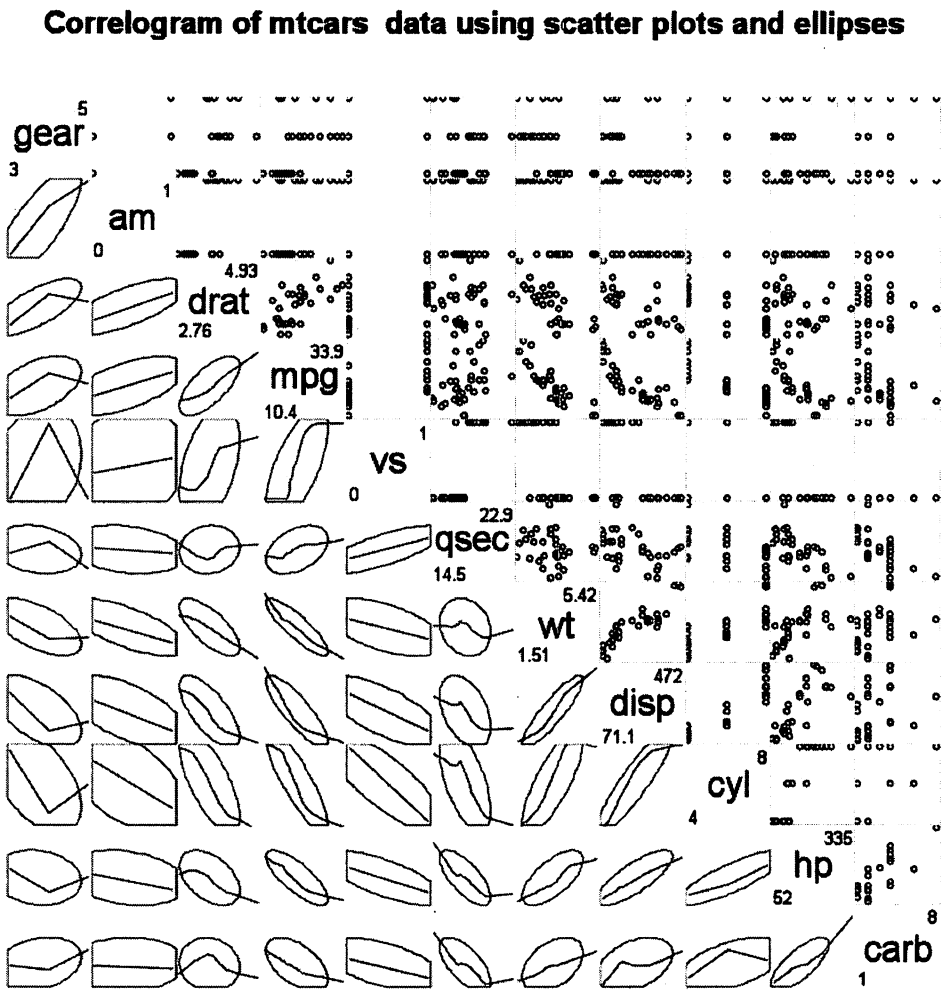


图11-21　mtcars数据框中变量的相关系数图。下三角区域包含平滑拟合曲线和置信椭圆，上三角区域包含散点图。主对角面板包含变量最小和最大值。矩阵的行和列利用主成分分析法进行了重排序

最后，我们再看一个例子。代码如下：

```
library(corrgram)
corrgram(mtcars, lower.panel=panel.shade,
         upper.panel=NULL, text.panel=panel.txt,
         main="Car Mileage Data (unsorted)")
```

生成的图形见图11-22。此处，我们在下三角区域使用了阴影，并保持原变量顺序不变，上三角区域留白。

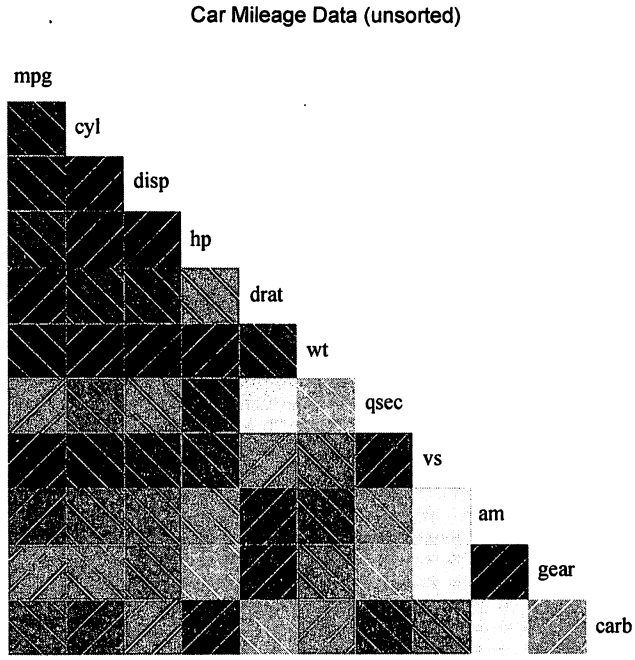


图11-22 mtcars数据框中变量的相关系数图。下三角区域的阴影代表相关系数的大小和正负。变量按初始顺序排列

在继续下文之前，这里说明一下，你可自主控制corrgram()函数中使用的颜色。例如，你可在col.corrgram()函数中用colorRampPallette()函数来指定四种颜色：

```
library(corrgram)
col.corrgram <- function(ncol){
                colorRampPalette(c("darkgoldenrod4", "burlywood1",
                                   "darkkhaki", "darkgreen"))(ncol)}
corrgram(mtcars, order=TRUE, lower.panel=panel.shade,
         upper.panel=panel.pie, text.panel=panel.txt,
         main="A Corrgram (or Horse) of a Different Color")
```

运行下代码，看看所得的结果。

相关系数图是检验定量变量中众多二元关系的一种有效方式。由于图形相对比较新颖，因此教会目标读者看懂图形将是最大的挑战。

想了解相关图的更多内容，可参考Michael Friendly的文章“Corrgrams: Exploratory Displays for Correlation Matrices”（下载网址为http://www.math.yorku.ca/SCS/Papers/corrgram.pdf）。

11.4 马赛克图

到目前为止，我们已经学习了许多可视化定量或连续型变量间关系的方法。但如果变量是类别型的呢？若只观察单个类别型变量，可以使用柱状图或者饼图；若存在两个类别型变量，可以使用三维柱状图（不过，这在R中不太容易做到）；但若有两个以上的类别型变量，该怎么办呢？

一种办法是绘制马赛克图（mosaic plot）。在马赛克图中，嵌套矩形面积正比于单元格频率，其中该频率即多维列联表中的频率。颜色和/或阴影可表示拟合模型的残差值。更多图形细节可参考Meyer、Zeileis和Hornick的“The Strucplot Framework: Visualizing Multi-way Contingency Tables with vcd”（2006）一文，或者Michael Friendly的统计图形主页（http://datavis.ca）。Steve Simon曾编辑过一个非常优秀的绘制马赛克图的概念教程，可在http://www.childrensmercy.org/stats/definitions/mosaic.htm获取。

vcd包中的mosaic()函数可以绘制马赛克图。（R基础安装中的mosaicplot()也可绘制马赛克图，但我还是推荐vcd包，因为它具有更多扩展功能。）以基础安装中的Titanic数据集为例，它包含存活或者死亡的乘客数、乘客的船舱等级（一等、二等、三等和船员）、性别（男性、女性），以及年龄层（儿童、成人）。这是一个被充分研究过的数据集。利用如下代码，你可以看到分类细节：

```
> ftable(Titanic)
                    Survived  No Yes
Class Sex    Age
1st   Male   Child           0   5
             Adult         118  57
      Female Child           0   1
             Adult           4 140
2nd   Male   Child           0  11
             Adult         154  14
      Female Child           0  13
             Adult          13  80
3rd   Male   Child          35  13
             Adult         387  75
      Female Child          17  14
             Adult          89  76
Crew  Male   Child           0   0
             Adult         670 192
      Female Child           0   0
             Adult           3  20
```

mosaic()函数可按如下方式调用：

```
mosaic(table)
```

其中*table*是数组形式的列联表。另外，也可用：

```
mosaic(formula, data=)
```

其中*formula*是标准的R表达式，data设定一个数据框或者表格。添加选项shade = TRUE将根据拟合模型的皮尔逊残差值对图形上色，添加选项legend = TRUE将展示残差的图例。

例如，使用：

```
library(vcd)
mosaic(Titanic, shade=TRUE, legend=TRUE)
```

和：

```
library(vcd)
mosaic(~Class+Sex+Age+Survived, data=Titanic, shade=TRUE, legend=TRUE)
```

都将生成图11-23。但表达式版本的代码可使你对图形中变量的选择和摆放拥有更多的控制权。

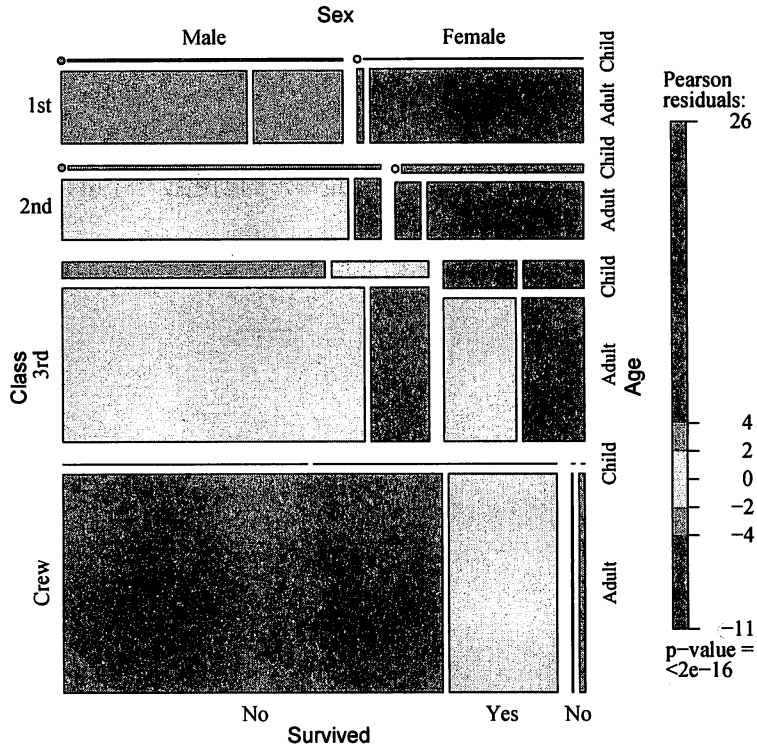


图11-23 按船舱等级、乘客性别和年龄层绘制的泰坦尼克号幸存者的马赛克图（另见彩插图11-23）

马赛克图隐含着大量的数据信息。例如：(1)从船员到头等舱，存活率陡然提高；(2)大部分孩子都处在三等舱和二等舱中；(3)在头等舱中的大部分女性都存活了下来，而三等舱中仅有一半女性存活；(4)船员中女性很少，导致该组的Survived标签重叠（图底部的No和Yes）。继续观察，你将发现更多有趣的信息。关注矩形的相对宽度和高度，你还能发现那晚其他什么秘密吗？

扩展的马赛克图添加了颜色和阴影来表示拟合模型的残差值。在本例中，蓝色阴影表明，在假定生存率与船舱等级、性别和年龄层无关的条件下，该类别下的生存率通常超过预期值。红色阴影则含义相反。一定要运行该例子的代码，这样你可以真实感受下着色图形的效果。图形表明，在模型的独立条件下，头等舱女性存活数和男性船员死亡数超过模型预期值。如果存活数与船舱等级、性别和年龄层独立，三等舱男性的存活数比模型预期值低。尝试运行`example(mosaic)`，可以了解更多马赛克图的细节。

11.5 小结

本章中，我们学习了许多展示两个或更多变量间关系的图形方法，包括二维和三维散点图、散点图矩阵、气泡图、折线图、相关系数图和马赛克图。其中一些方法是标准的图形方法，而有

些则相对更新颖。

这样，图形的定制（第3章）、单变量分布的展示（第6章）、回归模型的探究（第8章）和组间差异的可视化（第9章）等方法，就构成了你的可视化数据和提取数据信息的完备工具箱。

在后续各章中，通过学习其他专业化技术，比如潜变量模型图形绘制（第14章）、缺失数据模式的可视化方法（第15章）和单条件或多条件变量图形的创建技巧（第16章），你还可以大幅度提升自己的绘图能力。

下一章，我们将探究重抽样和自助法。它们都是计算机密集型方法，为你提供了一种分析数据的全新而独特的视角。

第12章 重抽样与自助法

本章内容

- 理解置换检验的逻辑
- 在线性模型中应用置换检验
- 利用自助法获得置信区间

在第7章、第8章和第9章中，通过假定观测数据抽样自正态分布或者其他性质较好的理论分布，我们学习了假设检验和总体参数的置信区间估计等统计方法。但在许多实际情况中统计假设并不一定满足，比如数据抽样于未知或混合分布、样本量过小、存在离群点、基于理论分布设计合适的统计检验过于复杂且数学上难以处理等情况，这时基于随机化和重抽样的统计方法就可派上用场。

本章，我们将探究两种应用广泛的依据随机化思想的统计方法：置换检验和自助法。过去，这些方法只有娴熟的编程者和统计专家才有能力使用。而现在，R中有了对应该方法的软件包，更多受众也可以轻松将它们应用到数据分析中了。

我们将重温一些用传统方法（如t检验、卡方检验、方差分析和回归）分析过的问题，看看如何用这些稳健的、计算机密集型的新方法来解决它们。为更好地理解12.2节，你最好首先回顾下第7章，而阅读12.3节则需要回顾第8章和第9章，本章其他各节可自由阅读。

12.1 置换检验

置换检验，也称随机化检验或重随机化检验，数十年前就已经被提出，但直到高速计算机的出现，该方法才有了真正的应用价值。

为理解置换检验的逻辑，考虑如下虚拟的问题。有两种处理条件的实验，十个受试者已经被随机分配到其中一种条件（A或B）中，相应的结果变量（`score`）也已经被记录。实验结果如表12-1所示。

图12-1以带状图形式展示了数据。此时，存在足够的证据说明两种处理方式的影响不同吗？

表12-1　虚拟的两分组问题

A 处 理	B 处 理
40	57
57	64
45	55
55	62
58	65

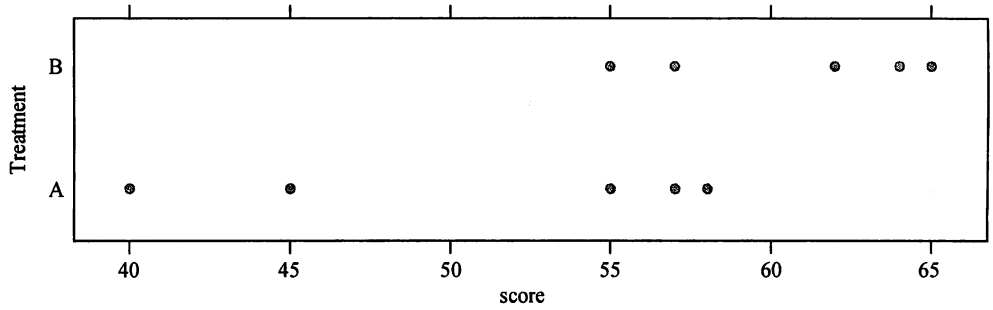


图12-1　表12-1中虚拟数据的带状图

在参数方法中，你可能会假设数据抽样自等方差的正态分布，然后使用假设独立分组的双尾t检验来验证结果。此时,零假设为A处理的总体均值与B处理的总体均值相等，你根据数据计算了t统计量，将其与理论分布进行比较，如果观测到的t统计量值十分极端，比如落在理论分布值的95%置信区间外，那么你将会拒绝零假设，断言在0.05的显著性水平下两组的总体均值不相等。

置换检验的思路与之不同。如果两种处理方式真的等价，那么分配给观测得分的标签（A处理或B处理）便是任意的。为检验两种处理方式的差异，我们可遵循如下步骤：

(1) 与参数方法类似，计算观测数据的t统计量，称为t0；

(2) 将10个得分放在一个组中；

(3) 随机分配五个得分到A处理中，并分配五个得分到B处理中；

(4) 计算并记录新观测的t统计量；

(5) 对每一种可能随机分配重复(3)~(4)步，此处有252种可能的分配组合；

(6) 将252个t统计量按升序排列，这便是基于（或以之为条件）样本数据的经验分布；

(7) 如果t0落在经验分布中间95%部分的外面，则在0.05的显著性水平下，拒绝两个处理组的总体均值相等的零假设。

注意，置换方法和参数方法都计算了相同的t统计量。但置换方法并不是将统计量与理论分布进行比较，而是将其与置换观测数据后获得的经验分布进行比较，根据统计量值的极端性判断是否有足够理由拒绝零假设。这种逻辑可以延伸至大部分经典统计检验和线性模型上来。

在先前的例子中，经验分布依据的是数据所有可能的排列组合。此时的置换检验称作“精确”检验。随着样本量的增加，获取所有可能排列的时间开销会非常大，这种情况下，你可以使用蒙特卡洛模拟，从所有可能的排列中进行抽样，获得一个近似的检验。

假如你觉得假定数据成正态分布并不合适，或者担心离群点的影响，又或者感觉对于标准的参数方法来说数据集太小，那么置换检验便提供了一个非常不错的选择。

R目前有一些非常全面而复杂的软件包可以用来做置换检验。本节剩余部分将关注两个有用的包：coin和lmPerm包。第一次使用之前应确保安装了这两个包：

```
install.packages(c("coin","lmPerm"))
```

coin对于独立性问题提供了一个非常全面的置换检验的框架，而lmPerm包则专门用来做方差分析和回归分析的置换检验。我们将依次对其进行介绍，并在本节最后简述R中其他可用的用于置换检验的包。

在继续本话题之前，请牢记：置换检验都是使用伪随机数来从所有可能的排列组合中进行抽样（当做近似检验时）。因此，每次检验的结果都有所不同。在R中设置随机数种子便可固定所生成的随机数。这样在你向别人分享自己的示例时，结果便可以重现。设定随机数种子为1234（即set.seed(1234)），可以重现本章所有的结果。

12.2 用 coin 包做置换检验

对于独立性问题，coin包提供了一个进行置换检验的一般性框架。通过该包，你可以回答如下问题。

- 响应值与组的分配独立吗？
- 两个数值变量独立吗？
- 两个类别型变量独立吗？

使用包中提供的函数（见表12-2），我们可以很便捷地做置换检验，它们与第7章的大部分传统统计检验是等价的。

表12-2 相对于传统检验，提供可选置换检验的coin函数

检　验	coin函数
两样本和*K*样本置换检验	oneway_test(y ~ A)
含一个分层（区组）因子的两样本和*K*样本置换检验	oneway_test(y ~ A | C)
Wilcoxon-Mann-Whitney秩和检验	wilcox_test(y ~ A)
Kruskal-Wallis检验	kruskal_test(y ~ A)
Person卡方检验	chisq_test(A ~ B)
Cochran-Mantel-Haenszel检验	cmh_test(A ~ B | C)
线性关联检验	lbl_test(D ~ E)
Spearman检验	spearman_test(y ~ x)
Friedman检验	friedman_test(y ~ A | C)
Wilcoxon符号秩检验	wilcoxsign_test(y1 ~ y2)

* 在coin函数中，y和x是数值变量，A和B是分类因子，C是类别型区组变量，D和E是有序因子，y1和y2是相匹配的数值变量。

表12-2列出来的每个函数都是如下形式：

```
function_name( formula, data, distribution= )
```

其中：

- *formula*描述的是要检验变量间的关系。示例可参见表12-2；
- data是一个数据框；
- distribution指定经验分布在零假设条件下的形式，可能值有exact，asymptotic和approximate。

若distribution = "exact"，那么在零假设条件下，分布的计算是精确的（即依据所有可能的排列组合）。当然，也可以根据它的渐进分布（distribution = "asymptotic"）或蒙特卡洛重抽样（distribution = "approxiamate(B = #)"）来做近似计算，其中#指所需重复的次数。distribution = "exact"当前仅可用于两样本问题。

注意　在coin包中，类别型变量和序数变量必须分别转化为因子和有序因子。另外，数据要以数据框形式存储。

在本节余下部分，我们将把表12-2中的一些置换检验应用到在先前章节出现的问题中，这样，你可以对传统的参数方法和非参数方法进行比较。本节最后，我们将通过一些高级拓展应用对coin包进行讨论。

12.2.1　独立两样本和K样本检验

首先，根据表12-2的虚拟数据，我们对独立样本t检验和单因素精确检验进行比较。结果见代码清单12-1。

代码清单12-1　虚拟数据中的t检验与单因素置换检验

```
> library(coin)
> score <- c(40, 57, 45, 55, 58, 57, 64, 55, 62, 65)
> treatment <- factor(c(rep("A",5), rep("B",5)))
> mydata <- data.frame(treatment, score)
> t.test(score~treatment, data=mydata, var.equal=TRUE)

        Two Sample t-test

data:  score by treatment
t = -2.3, df = 8, p-value = 0.04705
alternative hypothesis: true difference in means is not equal to 0
95 percent confidence interval:
 -19.04  -0.16
sample estimates:
mean in group A mean in group B
             51              61
```

```
> oneway_test(score~treatment, data=mydata, distribution="exact")

        Exact 2-Sample Permutation Test

data:  score by treatment (A, B)
Z = -1.9, p-value = 0.07143
alternative hypothesis: true mu is not equal to 0
```

传统t检验表明存在显著性差异（$p < 0.05$），而精确检验却表明差异并不显著（$p > 0.072$）。由于只有10个观测，我更倾向于相信置换检验的结果，在做出最后结论之前，还要多收集些数据。

现在来看Wilcoxon-Mann-Whitney U检验。第7章中，我们用wilcox.test()函数检验了美国南部监禁概率与非南部间的差异。现使用Wilcoxon秩和检验，可得：

```
> library(MASS)
> UScrime <- transform(UScrime, So = factor(So))
> wilcox_test(Prob ~ So, data=UScrime, distribution="exact")

        Exact Wilcoxon Mann-Whitney Rank Sum Test

data:  Prob by So (0, 1)
Z = -3.7, p-value = 8.488e-05
alternative hypothesis: true mu is not equal to 0
```

结果表明监禁在南部可能更多。注意在上面的代码中，数值变量So被转化为因子，因为coin包规定所有的类别型变量都必须以因子形式编码。另外，聪明的读者可能会发现此处结果与第7章wilcox.test()计算结果一样，这是因为wilcox.test()默认计算的也是精确分布。

最后，探究下K样本检验问题。在第9章，对于50个患者的样本，我们使用了单因素方差分析来评价五种药物疗法对降低胆固醇的效果。下面代码对其做了近似的K样本置换检验：

```
> library(multcomp)
> set.seed(1234)
> oneway_test(response~trt, data=cholesterol,
  distribution=approximate(B=9999))

        Approximative K-Sample Permutation Test

data:  response by
         trt (1time, 2times, 4times, drugD, drugE)
maxT = 4.7623, p-value < 2.2e-16
```

此处，参考分布得自于数据9999次的置换。设定随机数种子可让结果重现。结果表明各组间病人的响应值显著不同。

12.2.2 列联表中的独立性

通过chisq_test()或cmh_test()函数，我们可用置换检验判断两类别型变量的独立性。当数据可根据第三个类别型变量进行分层时，需要使用后一个函数。若变量都是有序型，可使用lbl_test()函数来检验是否存在线性趋势。

第7章中，我们用卡方检验评价了关节炎的治疗（treatment）与效果（improvement）间的关系。治疗有两个水平（安慰剂、治疗），效果有三个水平（无、部分、显著），变量Improved以有序因子形式编码。

若想实施卡方检验的置换版本，可用如下代码：

```
> library(coin)
> library(vcd)
> Arthritis <- transform(Arthritis,
  Improved=as.factor(as.numeric(Improved)))
> set.seed(1234)
> chisq_test(Treatment~Improved, data=Arthritis,
             distribution=approximate(B=9999))

                Approximative Pearson's Chi-Squared Test

data:  Treatment by Improved (1, 2, 3)
chi-squared = 13.055, p-value = 0.0018
```

此处经过9999次的置换，可获得一个近似的卡方检验。你可能会有疑问，为什么需要把变量Improved从一个有序因子变成一个分类因子？（好问题！）这是因为，如果你用有序因子，coin()将会生成一个线性与线性趋势检验，而不是卡方检验。虽然趋势检验在本例中是一个不错的选择，但是此处使用卡方检验可以同第7章所得的结果进行比较。

12.2.3　数值变量间的独立性

spearman_test()函数提供了两数值变量的独立性置换检验。第7章中，我们检验了美国文盲率与谋杀率间的相关性。如下代码可进行相关性的置换检验：

```
> states <- as.data.frame(state.x77)
> set.seed(1234)
> spearman_test(Illiteracy~Murder, data=states,
                distribution=approximate(B=9999))

        Approximative Spearman Correlation Test

data:  Illiteracy by Murder
Z = 4.7065, p-value < 2.2e-16
alternative hypothesis: true mu is not equal to 0
```

基于9999次重复的近似置换检验可知：独立性假设并不被满足。注意，state.x77是一个矩阵，在coin包中，必须将其转化为一个数据框。

12.2.4　两样本和K样本相关性检验

当处于不同组的观测已经被分配得当，或者使用了重复测量时，样本相关检验便可派上用场。对于两配对组的置换检验，可使用wilcoxsign_test()函数；多于两组时，使用friedman_test()函数。

第7章中，我们比较了城市男性中14～24年龄段（U1）与35～39年龄段（U2）间的失业率差

异。由于两个变量对于美国50个州都有记录，你便有了一个两依赖组设计（state是匹配变量），可使用精确Wilcoxon符号秩检验来判断两个年龄段间的失业率是否相等：

```
> library(coin)
> library(MASS)
> wilcoxsign_test(U1~U2, data=UScrime, distribution="exact")

        Exact Wilcoxon-Signed-Rank Test

data:  y by x (neg, pos)
         stratified by block
Z = 5.9691, p-value = 1.421e-14
alternative hypothesis: true mu is not equal to 0
```

结果表明两者的失业率是不同的。

12.2.5 深入探究

coin包提供了一个置换检验的一般性框架，可以分析一组变量相对于其他任意变量，是否与第二组变量（可根据一个区组变量分层）相互独立。特别地，independence_test()函数可以让用户从置换角度来思考大部分传统检验，进而在面对无法用传统方法解决的问题时，使用户可以自己构建新的统计检验。当然，这种灵活性也是有门槛的：要正确使用该函数必须具备丰富的统计知识。更多函数细节请参阅包附带的文档（运行vignette("coin")即可）。

下一节，你将学习lmPerm包，它提供了线性模型的置换方法，包括回归和方差分析。

12.3 lmPerm 包的置换检验

lmPerm包可做线性模型的置换检验。比如lmp()和aovp()函数即lm()和aov()函数的修改版，能够进行置换检验，而非正态理论检验。

lmp()和aovp()函数的参数与lm()和aov()函数类似，只额外添加了perm =参数。perm =选项的可选值有"Exact"、"Prob"或"SPR"。Exact根据所有可能的排列组合生成精确检验。Prob从所有可能的排列中不断抽样，直至估计的标准差在估计的p值0.1之下，判停准则由可选的Ca参数控制。SPR使用贯序概率比检验来判断何时停止抽样。注意，若观测数大于10，perm = "Exact"将自动默认转为perm = "Prob"，因为精确检验只适用于小样本问题。

为深入了解函数的工作原理，我们将对简单回归、多项式回归、多元回归、单因素方差分析、单因素协方差分析和双因素因子设计进行置换检验。

12.3.1 简单回归和多项式回归

第8章中，我们使用线性回归研究了15名女性的身高和体重间的关系。用lmp()代替lm()，可获得代码清单12-2中置换检验的结果。

代码清单12-2　简单线性回归的置换检验

```
> library(lmPerm)
> set.seed(1234)
> fit <- lmp(weight~height, data=women, perm="Prob")
[1] "Settings:  unique SS : numeric variables centered"
> summary(fit)

Call:
lmp(formula = weight ~ height, data = women, perm = "Prob")

Residuals:
   Min     1Q Median     3Q    Max
-1.733 -1.133 -0.383  0.742  3.117

Coefficients:
       Estimate Iter Pr(Prob)
height     3.45 5000   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 1.5 on 13 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.991,      Adjusted R-squared: 0.99
F-statistic: 1.43e+03 on 1 and 13 DF,  p-value: 1.09e-14
```

要拟合二次方程，可使用代码清单12-3中的代码。

代码清单12-3　多项式回归的置换检验

```
> library(lmPerm)
> set.seed(1234)
> fit <- lmp(weight~height + I(height^2), data=women, perm="Prob")
[1] "Settings:  unique SS : numeric variables centered"
> summary(fit)

Call:
lmp(formula = weight ~ height + I(height^2), data = women, perm = "Prob")

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-0.5094 -0.2961 -0.0094  0.2862  0.5971

Coefficients:
            Estimate Iter Pr(Prob)
height       -7.3483 5000   <2e-16 ***
I(height^2)   0.0831 5000   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.38 on 12 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.999,      Adjusted R-squared: 0.999
F-statistic: 1.14e+04 on 2 and 12 DF,  p-value: <2e-16
```

可以看到，用置换检验来检验这些回归是非常容易的，修改一点代码即可。输出结果也与lm()

函数非常相似。值得注意的是，增添的Iter栏列出了要达到判停准则所需的迭代次数。

12.3.2 多元回归

在第8章，多元回归被用来通过美国50个州的人口数、文盲率、收入水平和结霜天数预测犯罪率。将lmp()函数应用到此问题，结果参见代码清单12-4。

代码清单12-4 多元回归的置换检验

```
> library(lmPerm)
> set.seed(1234)
> states <- as.data.frame(state.x77)
> fit <- lmp(Murder~Population + Illiteracy+Income+Frost,
             data=states, perm="Prob")
[1] "Settings:  unique SS : numeric variables centered"
> summary(fit)

Call:
lmp(formula = Murder ~ Population + Illiteracy + Income + Frost,
    data = states, perm = "Prob")

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-4.79597 -1.64946 -0.08112  1.48150  7.62104

Coefficients:
            Estimate Iter Pr(Prob)
Population 2.237e-04   51   1.0000
Illiteracy 4.143e+00 5000   0.0004 ***
Income     6.442e-05   51   1.0000
Frost      5.813e-04   51   0.8627
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '. ' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.535 on 45 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.567,      Adjusted R-squared: 0.5285
F-statistic: 14.73 on 4 and 45 DF,  p-value: 9.133e-08
```

回顾第8章，正态理论中Population和Illiteracy均显著（$P<0.05$）。而该置换检验中，Population不再显著。当两种方法所得结果不一致时，你需要更加谨慎地审视数据，这很可能是因为违反了正态性假设或者存在离群点。

12.3.3 单因素方差分析和协方差分析

第9章中任意一种方差分析设计都可进行置换检验。首先，让我们看看9.1节中的单因素方差分析问题——各种疗法对降低胆固醇的影响。代码和结果见代码清单12-5。

代码清单12-5 单因素方差分析的置换检验

```
> library(lmPerm)
> library(multcomp)
```

```
> set.seed(1234)
> fit <- aovp(response~trt, data=cholesterol, perm="Prob")
[1] "Settings:  unique SS "
> summary(fit)
Component 1 :
            Df R Sum Sq R Mean Sq Iter  Pr(Prob)
trt          4  1351.37    337.84 5000 < 2.2e-16 ***
Residuals   45   468.75     10.42
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '. ' 0.1 ' ' 1
```

结果表明各疗法的效果不全相同。

协方差分析的置换检验取自第9章的问题——当控制妊娠期时间相同时，观测四种药物剂量对鼠崽体重的影响。代码和结果参见代码清单12-6。

代码清单12-6　单因素协方差分析的置换检验

```
> library(lmPerm)
> set.seed(1234)
> fit <- aovp(weight ~ gesttime + dose, data=litter, perm="Prob")
[1] "Settings:  unique SS : numeric variables centered"
> summary(fit)
Component 1 :
            Df R Sum Sq R Mean Sq Iter Pr(Prob)
gesttime     1   161.49   161.493 5000   0.0006 ***
dose         3   137.12    45.708 5000   0.0392 *
Residuals   69  1151.27    16.685
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

依据p值可知，当控制妊娠期时间相同时，四种药物剂量对鼠崽的体重影响不相同。

12.3.4　双因素方差分析

本节最后，我们对析因实验设计进行置换检验。以第9章中的维生素C对豚鼠牙齿生长的影响为例，该实验两个可操作的因子是剂量（三水平）和喂食方式（两水平）。10只豚鼠分别被分配到每种处理组合中，形成一个3 × 2的析因实验设计。置换检验结果参见代码清单12-7。

代码清单12-7　双因素方差分析的置换检验

```
> library(lmPerm)
> set.seed(1234)
> fit <- aovp(len~supp*dose, data=ToothGrowth, perm="Prob")
[1] "Settings:  unique SS : numeric variables centered"
> summary(fit)
Component 1 :
            Df R Sum Sq R Mean Sq Iter Pr(Prob)
supp         1   205.35    205.35 5000  < 2e-16 ***
dose         1  2224.30   2224.30 5000  < 2e-16 ***
supp:dose    1    88.92     88.92 2032  0.04724 *
Residuals   56   933.63     16.67
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

在0.05的显著性水平下，三种效应都不等于0，在0.01的水平下，只有主效应显著。

值得注意的是，当将aovp()应用到方差分析设计中时，它默认使用唯一平方和法（SAS也称为类型III平方和）。每种效应都会依据其他效应做相应调整。R中默认的参数化方差分析设计使用的是序贯平方和（SAS是类型I平方和）。每种效应依据模型中先出现的效应做相应调整。对于平衡设计，两种方法结果相同，但是对于每个单元格观测数不同的不平衡设计，两种方法结果则不同。不平衡性越大，结果分歧越大。若在aovp()函数中设定seqs = TRUE，可以生成你想要的序贯平方和。关于类型I和类型III的平方和的更多细节，请参考9.2节。

12.4 置换检验点评

除coin和lmPerm包外，R还提供了其他可做置换检验的包。perm包能实现coin包中的部分功能，因此可作为coin包所得结果的验证。corrperm包提供了有重复测量的相关性的置换检验。logregperm包提供了Logistic回归的置换检验。另外一个非常重要的包是glmperm，它涵盖了广义线性模型的置换检验。对于广义线性模型，请参见第13章。

依靠基础的抽样分布理论知识，置换检验提供了另外一个十分强大的可选检验思路。对于上面描述的每一种置换检验，我们完全可以在做统计假设检验时不理会正态分布、t分布、F分布或者卡方分布。

你可能已经注意到，基于正态理论的检验与上面置换检验的结果非常接近。在这些问题中数据表现非常好，两种方法结果的一致性也验证了正态理论方法适用于上述示例。

当然，置换检验真正发挥功用的地方是处理非正态数据（如分布偏倚很大）、存在离群点、样本很小或无法做参数检验等情况。不过，如果初始样本对感兴趣的总体情况代表性很差，即使是置换检验也无法提高推断效果。

置换检验主要用于生成检验零假设的p值，它有助于回答“效应是否存在”这样的问题。不过，置换方法对于获取置信区间和估计测量精度是比较困难的。幸运的是，这正是自助法大显神通的地方。

12.5 自助法

所谓自助法，即从初始样本重复随机替换抽样，生成一个或一系列待检验统计量的经验分布。无需假设一个特定的理论分布，便可生成统计量的置信区间，并能检验统计假设。

举一个例子便可非常清楚地阐释自助法的思路。比如，你想计算一个样本均值95%的置信区间。样本现有10个观测，均值为40，标准差为5。如果假设均值的样本分布为正态分布，那么（1-α/2）%的置信区间计算如下：

$$\bar{X} - t\frac{s}{\sqrt{n}} < \mu < \bar{X} + t\frac{s}{\sqrt{n}}$$

其中，t是自由度为n-1的t分布的1-α上界值。对于95%的置信区间，可得40 - 2.262(5/3.163) < μ < 40 + 2.262(5/3.162) 或者 36.424 < μ < 43.577。以这种方式创建的95%置信区间将会包含真实的总体均值。

倘若你假设均值的样本分布不是正态分布，该怎么办呢？可使用自助法。

(1) 从样本中随机选择10个观测，抽样后再放回。有些观测可能会被选择多次，有些可能一直都不会被选中。

(2) 计算并记录样本均值。

(3) 重复1和2一千次。

(4) 将1000个样本均值从小到大排序。

(5) 找出样本均值2.5%和97.5%的分位点。此时即初始位置和最末位置的第25个数，它们就限定了95%的置信区间。

本例中，样本均值很可能服从正态分布，自助法优势不太明显。但在其他许多案例中，自助法优势会十分明显。比如，你想估计样本中位数的置信区间，或者两样本中位数之差，该怎么做呢？正态理论没有现成的简单公式可套用，而自助法此时却是不错的选择。即使潜在分布未知，或出现了离群点，或者样本量过小，再或者是没有可供选择的参数方法，自助法将是生成置信区间和做假设检验的一个利器。

12.6　boot 包中的自助法

boot包扩展了自助法和重抽样的相关用途。你可以对一个统计量（如中位数）或一个统计量向量（如一列回归系数）使用自助法。使用自助法前请确保下载并安装了boot包：

```
install.packages("boot")
```

自助法过程看起来复杂，但你一看例子就会十分明了。

一般来说，自助法有三个主要步骤。

(1) 写一个能返回待研究统计量值的函数。如果只有单个统计量（如中位数），函数应该返回一个数值；如果有一列统计量（如一列回归系数），函数应该返回一个向量。

(2) 为生成R中自助法所需的有效统计量重复数，使用boot()函数对上面所写的函数进行处理。

(3) 使用boot.ci()函数获取第(2)步生成的统计量的置信区间。

现在举例说明。

主要的自助法函数是boot()，它的格式为：

```
bootobject <- boot(data=, statistic=, R=, ...)
```

参数描述见表12-3。

表12-3　boot()函数的参数

参　数	描　述
data	向量、矩阵或者数据框
statistic	生成k个统计量以供自举的函数（k=1时对单个统计量进行自助抽样） 函数需包括indices参数，以便boot()函数用它从每个重复中选择实例（例子见下文）
R	自助抽样的次数
...	其他对生成待研究统计量有用的参数，可在函数中传输

boot()函数调用统计量函数R次，每次都从整数1:nrow(data)中生成一列有放回的随机指标，这些指标被统计量函数用来选择样本。统计量将根据所选样本进行计算，结果存储在*bootobject*中。*bootobject*结构的描述见表12-4。

表12-4 boot()函数中返回对象所含的元素

元素	描述
t0	从原始数据得到的k个统计量的观测值
t	一个R × k矩阵，每行即k个统计量的自助重复值

你可以如*bootobject$t0*和*bootobject$t*这样来获取这些元素。

一旦生成了自助样本，可通过print()和plot()来检查结果。如果结果看起来还算合理，使用boot.ci()函数获取统计量的置信区间。格式如下：

```
boot.ci(bootobject, conf=, type= )
```

参数见表12-5。

表12-5 boot.ci()函数的参数

参数	描述
bootobject	boot()函数返回的对象
conf	预期的置信区间（默认：conf = 0.95）
type	返回的置信区间类型。可能值为norm、basic、stud、perc、bca和all（默认：type = all）

type参数设定了获取置信区间的方法。perc方法（分位数）展示的是样本均值，bca将根据偏差对区间做简单调整。而我发现bca在大部分情况中都是更可取的。参见Mooney和Duval(1993)的书籍，他们对以上方法都有介绍。

本节接下来介绍如何对单个统计量和统计量向量使用自助法。

12.6.1 对单个统计量使用自助法

以1974年*Motor Trend*杂志中的mtcars数据集为例，它包含32辆汽车的信息。假设你正使用多元回归根据车重（1b/1000）和发动机排量（cu.in.，即立方英寸）来预测汽车每加仑行驶的英里数，除了标准的回归统计量，你还想获得95%的R平方值的置信区间（预测变量对响应变量可解释的方差比），那么便可使用非参数的自助法来获取置信区间。

首要任务是写一个获取R平方值的函数：

```
rsq <- function(formula, data, indices) {
        d <- data[indices,]
        fit <- lm(formula, data=d)
        return(summary(fit)$r.square)
}
```

函数返回回归的R平方值。d <- data[indices,]必须声明，因为boot()要用其来选择样本。

你能做大量的自助抽样（比如1000），代码如下：

```
library(boot)
set.seed(1234)
results <- boot(data=mtcars, statistic=rsq,
                R=1000, formula=mpg~wt+disp)
```

boot的对象可以输出，代码如下：

```
> print(results)

ORDINARY NONPARAMETRIC BOOTSTRAP


Call:
boot(data = mtcars, statistic = rsq, R = 1000, formula = mpg ~
    wt + disp)


Bootstrap Statistics :
     original     bias    std. error
t1* 0.7809306 0.01333670  0.05068926
```

也可用plot(results)来绘制结果，图形见图12-2。

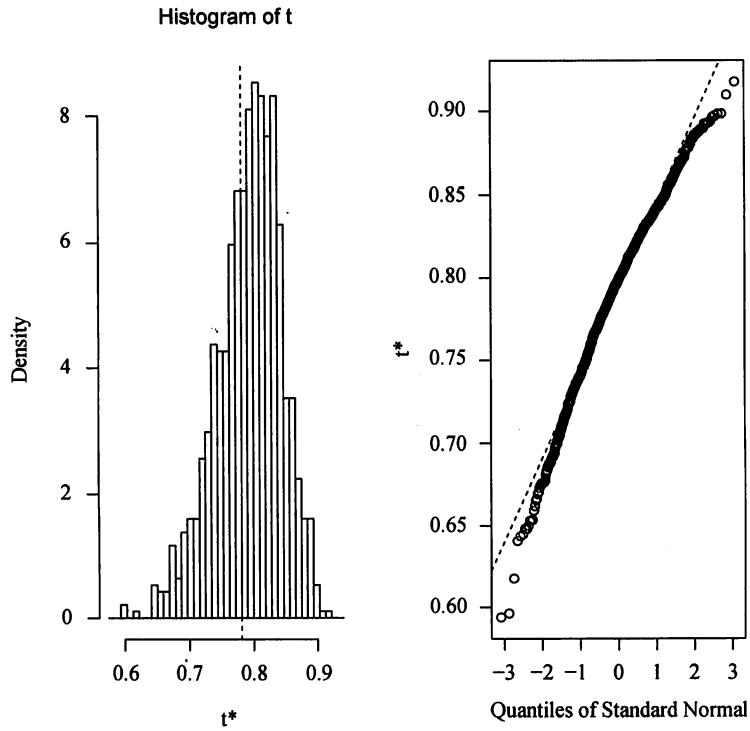


图12-2　自助法所得R平方值的均值

在图12-2中可以看到，自助的R平方值不呈正态分布。它的95%的置信区间可以通过如下代码获得：

```
> boot.ci(results, type=c("perc", "bca"))
BOOTSTRAP CONFIDENCE INTERVAL CALCULATIONS
Based on 1000 bootstrap replicates

CALL :
boot.ci(boot.out = results, type = c("perc", "bca"))

Intervals :
Level     Percentile            BCa
95%   ( 0.6838,  0.8833 )   ( 0.6344,  0.8549 )
Calculations and Intervals on Original Scale
Some BCa intervals may be unstable
```

从该例可以看到，生成置信区间的不同方法将会导致获得不同的区间。本例中的依偏差调整区间方法与分位数方法稍有不同。两例中，由于0都在置信区间外，零假设H0：R平方值=0都被拒绝。

本节中，我们估计了单个统计量的置信区间，下一节我们将估计多个统计量的置信区间。

12.6.2 多个统计量的自助法

在先前的例子中，自助法被用来估计单个统计量（R平方）的置信区间。继续该例，让我们获取一个统计量向量——三个回归系数（截距项、车重和发动机排量）——95%的置信区间。

首先，创建一个返回回归系数向量的函数：

```
bs <- function(formula, data, indices) {
        d <- data[indices,]
        fit <- lm(formula, data=d)
        return(coef(fit))
}
```

然后使用该函数自助抽样1000次：

```
library(boot)
set.seed(1234)
results <- boot(data=mtcars, statistic=bs,
                R=1000, formula=mpg~wt+disp)
> print(results)
ORDINARY NONPARAMETRIC BOOTSTRAP
Call:
boot(data = mtcars, statistic = bs, R = 1000, formula = mpg ~
    wt + disp)

Bootstrap Statistics :
    original    bias    std. error
t1*  34.9606  0.137873     2.48576
t2*  -3.3508 -0.053904     1.17043
t3*  -0.0177 -0.000121     0.00879
```

当对多个统计量自助抽样时，添加一个索引参数，指明plot()和boot.ci()函数所分析

bootobject$t的列。在本例中，索引1指截距项，索引2指车重，索引3指发动机排量。如下代码即用于绘制车重结果：

```
plot(results, index=2)
```

图形结果见图12-3。

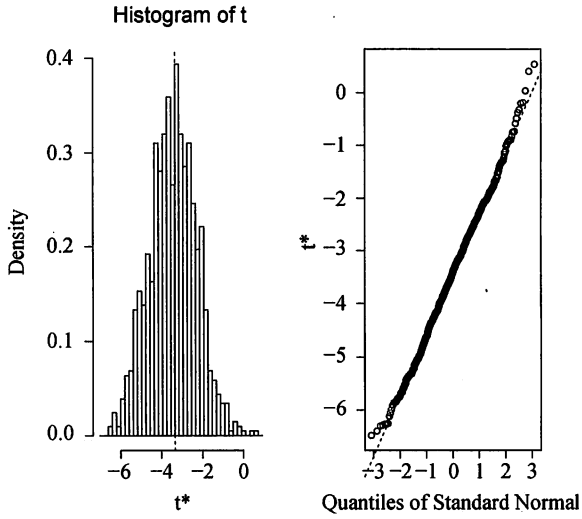


图12-3　自助法所得车重回归系数的分布

为获得车重和发动机排量95%的置信区间，使用代码：

```
> boot.ci(results, type="bca", index=2)
BOOTSTRAP CONFIDENCE INTERVAL CALCULATIONS
Based on 1000 bootstrap replicates

CALL :
boot.ci(boot.out = results, type = "bca", index = 2)
Intervals :
Level       BCa
95%   (-5.66, -1.19 )
Calculations and Intervals on Original Scale

> boot.ci(results, type="bca", index=3)

BOOTSTRAP CONFIDENCE INTERVAL CALCULATIONS
Based on 1000 bootstrap replicates

CALL :
boot.ci(boot.out = results, type = "bca", index = 3)

Intervals :
Level       BCa
95%   (-0.0331,  0.0010 )
Calculations and Intervals on Original Scale
```

注意 在先前例子中，我们每次都对整个样本数据进行重抽样。如果假定预测变量有固定水平（如精心设计的实验），那么我们最好仅对残差项进行重抽样。参考Mooney和Duval（1993，pp.16-17），其中有简单的解释和算法。

在结束自助法介绍前，我们来关注两个常被提出的有价值的问题。

- 初始样本需要多大？
- 应该重复多少次？

对于第一个问题，我们无法给出简单的回答。有些人认为只要样本能够较好地代表总体，初始样本大小为20～30即可得到足够好的结果。从感兴趣的总体中随机抽样的方法可信度最高，它能够保证初始样本的代表性。对于第二个问题，我发现1000次重复在大部分情况下都可满足要求。由于计算机资源变得廉价，如果你愿意，也可以增加重复的次数。

置换检验和自助法的信息资源非常丰富。一个非常优秀的入门教程是Yu的在线文章“Resampling Methods: Concepts, Applications, and Justification”（2003）。而Good(2006)则是一份很全面的重抽样概要参考资料，其中包含R代码。关于自助法，Mooney和Duval(1993)给出了一个不错的简介。当然，基础性的自助法资料还是Efron和Tibshirani(1998)的文章。最后，还有许多非常不错的在线资源，比如Simon(1997)、Canty(2002)、Shah(2005)和Fox(2002)。

12.7 小结

本章，我们介绍了一系列基于随机化和重抽样的计算机密集型方法，它们使你无需理论分布的知识便能够进行假设检验，获得置信区间。当数据来自未知分布，或者存在严重的离群点，或者样本量过小，又或者没有参数方法可以回答你感兴趣的假设问题时，这些方法是非常实用的。

本章的这些方法真的是令人振奋，因为当标准的数据假设不满足，或者你对于解决这些问题毫无头绪时，利用它们可以另辟蹊径。但是，置换检验和自助法并不是万能的，它们无法将烂数据转化为好数据。当初始样本对于总体情况的代表性不佳，或者样本量过小而无法准确地反映总体情况，这些方法也是爱莫能助。

在下一章，我们将学习一些数据模型，它们的变量服从已知但不必为正态的分布。

Part 4 第四部分

高级方法

在本书最后这一部分，我们将学习统计分析和绘图的高级方法，从而让你拥有一个完整的数据分析工具包。第 13 章将第 8 章中的回归方法扩展至非参数方法，适用于非正态分布的数据。该章首先讨论广义线性模型，然后重点讲解结果变量为类别型变量（Logistic 回归）或计数型变量（泊松回归）时的案例。

由于多元变量内在的复杂性，因此高维变量的处理变得非常具有挑战性。第 14 章介绍了两种流行的探究和简化多元数据的方法：主成分法和因子分析法。主成分法用来将大量相关变量转化为一组较少的不相关复合变量，因子分析法则通过一组潜在的变量来发现潜在的数据结构。这一章将逐步介绍实施步骤。

研究者常常会处理不完整数据集。第 15 章讲解普遍存在的缺失值问题的现代处理方法。另外，R 支持多种分析不完整数据集的简洁方法。这一章将会介绍一些最佳的，同时还会就哪些方法适合采用，哪些需要避免给出提示。

第 16 章将以 R 中高级的、实用的数据可视化方法来结束对图形展现方法的讨论。该章内容包括如何使用 `lattice` 包对复杂数据进行可视化呈现，并简单介绍了新颖的、越来越受欢迎的 `ggplot2` 包。最后，该章还会回顾一些包，它们提供了与图形进行实时交互的函数。

学习完第四部分后，你便可应用这些工具来处理各种复杂的数据分析问题了。比如对非正态结果变量的建模，处理大量高相关性的变量以及散乱的、不完整的数据。另外，你还将掌握可对复杂数据进行可视化的实用而有创造性的方法。

第13章 广义线性模型

本章内容

- 建立广义线性模型
- 预测类别型变量
- 计数型数据建模

第8章（回归）和第9章（方差分析）中，我们探究了线性模型，它们可以通过一系列连续型和/或类别型预测变量来预测正态分布的响应变量。但在许多情况下，假设因变量为正态分布（甚至连续型变量）并不合理，例如下面这几种情况。

- 结果变量可能是类别型的。二值变量（比如：是/否、通过/失败、活着/死亡）和多分类变量（比如差/良好/优秀）都显然不是正态分布。
- 结果变量可能是计数型的（比如，一周交通事故的数目，每日酒水消耗的数量）。这类变量都是非负的有限值，而且它们的均值和方差通常都是相关的（正态分布变量间不是如此，而是相互独立）。

广义线性模型扩展了线性模型的框架，它包含了非正态因变量的分析。

在本章中，我们将首先简要概述广义线性模型，并介绍如何使用`glm()`函数来进行估计。然后我们将重点关注该框架中两种流行的模型：Logistic回归（因变量为类别型）和泊松回归（因变量为计数型）。

为了让讨论更有吸引力，我们将把广义线性模型应用到两个用标准线性模型无法轻易解决的问题上。

- 什么样的个人信息、人口统计信息和人际关系信息可以作为变量，用来预测婚姻出轨问题？此时，结果变量为二值型（出轨/没出轨）。
- 药物治疗对于八周中所发生的癫痫次数有何影响？此时，结果变量为计数型（癫痫次数）。

我们将利用Logistic回归来阐释第一个问题，用泊松回归阐释第二个问题。建模过程中，将还考虑对每种方法进行扩展。

13.1 广义线性模型和 glm() 函数

许多广泛应用的、流行的数据分析方法其实都归属于广义线性模型框架。本节中，我们将简

短回顾这些方法背后的理论。你可跳过本节，稍后再回头阅读，这对于模型理解没有太大影响。

现假设你想要对响应变量Y和p个预测变量$X_1 \ldots X_p$间的关系进行建模。在标准线性模型中，你可以假设Y呈正态分布，关系的形式为：

$$\mu_Y = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j X_j$$

该等式表明响应变量的条件均值是预测变量的线性组合。参数β_j指一单位X_j的变化造成的Y预期的变化，β_0指当所有预测变量都为0时Y的预期值。对于该等式，你可通俗地理解为：给定一系列X变量的值，赋予X变量合适的权重，然后将它们加起来，便可预测Y观测值分布的均值。

值得注意的是，你并没有对预测变量X_j做任何分布的假设，与Y不同，它们不需要呈正态分布。实际上，它们常为类别型变量（比如方差分析设计）。另外，对预测变量使用非线性函数也是允许的，比如你常会使用预测变量X^2或者$X_1 \times X_2$，只要等式的参数（$\beta_0, \beta_1, \cdots, \beta_p$）为线性即可。

广义线性模型拟合的形式为：

$$g(\mu_Y) = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j X_j$$

其中$g(\mu_Y)$是条件均值的函数（称为连接函数）。另外，你可放松Y为正态分布的假设，改为Y服从指数分布族中的一种分布即可。设定好连接函数和概率分布后，便可以通过最大似然估计的多次迭代推导出各参数值。

13.1.1 glm()函数

R中可通过glm函数（还可用其他专门的函数）拟合广义线性模型。它的形式与lm()类似，只是多了一些参数。函数的基本形式为：

```
glm(formula, family=family(link=function), data=)
```

表13-1列出了概率分布（*family*）和相应默认的连接函数（*function*）。

表13-1 glm()的参数

分布族	默认的连接函数
binomial	(link = "logit")
gaussian	(link = "identity")
gamma	(link = "inverse")
inverse.gaussian	(link = "1/mu^2")
poisson	(link = "log")
quasi	(link = "identity", variance = "constant")
quasibinomial	(link = "logit")
quasipoisson	(link = "log")

glm()函数可以拟合许多流行的模型，比如Logistic回归、泊松回归和生存分析（此处不考虑）。下面对前两个模型进行阐述。假设你有一个响应变量（Y）、三个预测变量（X1、X2、X3）和一个包含数据的数据框（mydata）。

Logistic回归适用于二值响应变量（0,1）。模型假设Y服从二项分布，线性模型的拟合形式为：

$$\ln\left(\frac{\pi}{1-\pi}\right)=\beta_0+\sum_{j=1}^{p}\beta_j X_j$$

其中$\pi=\mu_Y$是Y的条件均值（即给定一系列X的值时Y = 1的概率），($\pi/1-\pi$)为Y = 1 时的优势比，log($\pi/1-\pi$)为对数优势比，或logit。本例中，log($\pi/1-\pi$)为连接函数，概率分布为二项分布．可用如下代码拟合Logistic回归模型：

```
glm(Y~X1+X2+X3, family=binomial(link="logit"), data=mydata)
```

Logistic回归在13.2节有更详细的介绍。

泊松回归适用于在给定时间内响应变量为事件发生数目的情形。它假设Y服从泊松分布，线性模型的拟合形式为：

$$\ln(\lambda)=\beta_0+\sum_{j=1}^{p}\beta_j X_j$$

其中λ是Y的均值（也等于方差）。此时，连接函数为log(λ)，概率分布为泊松分布，可用如下代码拟合泊松回归模型：

```
glm(Y~X1+X2+X3, family=poisson(link="log"), data=mydata)
```

泊松回归在13.3节有介绍。

值得注意的是，标准线性模型也是广义线性模型的一个特例。如果令连接函数$g(\mu_Y)=\mu_Y$或恒等函数，并设定概率分布为正态（高斯）分布，那么：

```
glm(Y~X1+X2+X3, family=gaussian(link="identity"), data=mydata)
```

生成的结果与下列代码的结果相同：

```
lm(Y~X1+X2+X3, data=mydata)
```

总之，广义线性模型通过拟合响应变量的条件均值的一个函数（不是响应变量的条件均值），假设响应变量服从指数分布族中的某个分布（并不仅限于正态分布），极大地扩展了标准线性模型。模型参数估计的推导依据的是极大似然估计，而非最小二乘法。

13.1.2　连用的函数

与分析标准线性模型时`lm()`连用的许多函数在`glm()`中都有对应的形式，其中一些常见的函数见表13-2。

表13-2　与`glm()`连用的函数

函　数	描　述
`summary()`	展示拟合模型的细节
`coefficients()`、`coef()`	列出拟合模型的参数（截距项和斜率）
`confint()`	给出模型参数的置信区间（默认为95%）

（续）

函　数	描　述
residuals()	列出拟合模型的残差值
anova()	生成两个拟合模型的方差分析表
plot()	生成评价拟合模型的诊断图
predict()	用拟合模型对新数据集进行预测

我们将在后面章节讲解这些函数的示例，在下一节中，我们将简要介绍模型适用性的评价。

13.1.3 模型拟合和回归诊断

与标准（OLS）线性模型一样，模型适用性的评价对于广义线性模型也非常重要。但遗憾的是，对于标准的评价过程，统计圈子仍莫衷一是。一般来说，你可以使用第8章中描述的方法，但要牢记以下建议。

当评价模型的适用性时，你可以绘制初始响应变量的预测值与残差的图形。例如，如下代码可绘制一个常见的诊断图：

```
plot(predict(model, type="response"),
     residuals(model, type= "deviance"))
```

其中，model为glm()函数返回的对象。

R将列出帽子值（hat value）、学生化残差值和Cook距离统计量的近似值。不过，对于识别异常点的阈值，现在并没统一答案，它们都是通过相互比较来进行判断。其中一个方法就是绘制各统计量的参考图，然后找出异常大的值。例如，如下代码可创建三幅诊断图：

```
plot(hatvalues(model))
plot(rstudent(model))
plot(cooks.distance(model))
```

你还可以用其他方法，代码如下：

```
library(car)
influencePlot(model)
```

它可以创建一个综合性的诊断图。在后面的图形中，横轴代表杠杆值，纵轴代表学生化残差值，而绘制的符号大小与Cook距离大小成正比。

当响应变量有许多值时，诊断图非常有用；而当响应变量只有有限个值时（比如Logistic回归），诊断图的功效就会降低很多。

若想更深入了解广义线性模型的回归诊断，可参考Fox（2008）和Faraway（2006）。本章后面几节将详细介绍两个最流行的广义线性模型：Logistic回归和泊松回归。

13.2 Logistic 回归

当通过一系列连续型和/或类别型预测变量来预测二值型结果变量时，Logistic回归是一个非常有用的工具。以AER包中的数据框Affairs为例，我们将通过探究婚外情的数据来阐述Logistic

回归的过程。首次使用该数据前，请确保已下载和安装此软件包（使用install.packages("AER")）。

婚外情数据即著名的“Fair's Affairs”，取自于1969年《今日心理》（*Psychology Today*）所做的一个非常有代表性的调查，而Greene（2003）和Fair（1978）都对它进行过分析。该数据从601个参与者身上收集了9个变量，包括一年来婚外私通的频率以及参与者性别、年龄、婚龄、是否有小孩、宗教信仰程度（5分制，1分表示反对，5分表示非常信仰）、学历、职业（逆向编号的戈登7种分类），还有对婚姻的自我评分（5分制，1表示非常不幸福，5表示非常幸福）。

我们先看一些描述性的统计信息：

```
> data(Affairs, package="AER")
> summary(Affairs)
    affairs          gender          age          yearsmarried     children
 Min.   : 0.000   female:315   Min.   :17.50   Min.   : 0.125   no :171
 1st Qu.: 0.000   male  :286   1st Qu.:27.00   1st Qu.: 4.000   yes:430
 Median : 0.000                Median :32.00   Median : 7.000
 Mean   : 1.456                Mean   :32.49   Mean   : 8.178
 3rd Qu.: 0.000                3rd Qu.:37.00   3rd Qu.:15.000
 Max.   :12.000                Max.   :57.00   Max.   :15.000
 religiousness     education       occupation        rating
 Min.   :1.000   Min.   : 9.00   Min.   :1.000   Min.   :1.000
 1st Qu.:2.000   1st Qu.:14.00   1st Qu.:3.000   1st Qu.:3.000
 Median :3.000   Median :16.00   Median :5.000   Median :4.000
 Mean   :3.116   Mean   :16.17   Mean   :4.195   Mean   :3.932
 3rd Qu.:4.000   3rd Qu.:18.00   3rd Qu.:6.000   3rd Qu.:5.000
 Max.   :5.000   Max.   :20.00   Max.   :7.000   Max.   :5.000

> table(Affairs$affairs)
  0   1   2   3   7  12
451  34  17  19  42  38
```

从这些统计信息可以看到，52%的调查对象是女性，72%的人有孩子，样本年龄的中位数为32岁。对于响应变量，72%的调查对象表示过去一年中没有婚外情（451/601），而婚外偷腥的最多次数为12（占了6%）。

虽然这些婚姻的轻率举动次数被记录下来，但此处我们感兴趣的是二值型结果（有过一次婚外情/没有过婚外情）。按照如下代码，你可将affairs转化为二值型因子ynaffair。

```
> Affairs$ynaffair[Affairs$affairs  > 0] <- 1
> Affairs$ynaffair[Affairs$affairs == 0] <- 0
> Affairs$ynaffair <- factor(Affairs$ynaffair,
                             levels=c(0,1),
                             labels=c("No","Yes"))
> table(Affairs$ynaffair)
No Yes
451 150
```

该二值型因子现可作为Logistic回归的结果变量：

```
> fit.full <- glm(ynaffair ~ gender + age + yearsmarried + children +
                  religiousness + education + occupation +rating,
                  data=Affairs,family=binomial())
```

```
> summary(fit.full)

Call:
glm(formula = ynaffair ~ gender + age + yearsmarried + children +
    religiousness + education + occupation + rating, family = binomial(),
    data = Affairs)

Deviance Residuals:
   Min      1Q  Median      3Q     Max
-1.571  -0.750  -0.569  -0.254   2.519

Coefficients:
              Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)     1.3773     0.8878    1.55  0.12081
gendermale      0.2803     0.2391    1.17  0.24108
age            -0.0443     0.0182   -2.43  0.01530 *
yearsmarried    0.0948     0.0322    2.94  0.00326 **
childrenyes     0.3977     0.2915    1.36  0.17251
religiousness  -0.3247     0.0898   -3.62  0.00030 ***
education       0.0211     0.0505    0.42  0.67685
occupation      0.0309     0.0718    0.43  0.66663
rating         -0.4685     0.0909   -5.15  2.6e-07 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

    Null deviance: 675.38  on 600  degrees of freedom
Residual deviance: 609.51  on 592  degrees of freedom
AIC: 627.5

Number of Fisher Scoring iterations: 4
```

从回归系数的p值（最后一栏）可以看到，性别、是否有孩子、学历和职业对方程的贡献都不显著（你无法拒绝参数为0的假设）。去除这些变量重新拟合模型，检验新模型是否拟合得好：

```
> fit.reduced <- glm(ynaffair ~ age + yearsmarried + religiousness +
                     rating, data=Affairs, family=binomial())
> summary(fit.reduced)

Call:
glm(formula = ynaffair ~ age + yearsmarried + religiousness + rating,
    family = binomial(), data = Affairs)

Deviance Residuals:
   Min      1Q  Median      3Q     Max
-1.628  -0.755  -0.570  -0.262   2.400

Coefficients:
              Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)     1.9308     0.6103    3.16  0.00156 **
age            -0.0353     0.0174   -2.03  0.04213 *
yearsmarried    0.1006     0.0292    3.44  0.00057 ***
religiousness  -0.3290     0.0895   -3.68  0.00023 ***
rating         -0.4614     0.0888   -5.19  2.1e-07 ***
```

```
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

    Null deviance: 675.38  on 600  degrees of freedom
Residual deviance: 615.36  on 596  degrees of freedom
AIC: 625.4

Number of Fisher Scoring iterations: 4
```

新模型的每个回归系数都非常显著（p<0.05）。由于两模型嵌套（fit.reduced是fit.full的一个子集），你可以使用anova()函数对它们进行比较，对于广义线性回归，可用卡方检验。

```
> anova(fit.reduced, fit.full, test="Chisq")
Analysis of Deviance Table

Model 1: ynaffair ~ age + yearsmarried + religiousness + rating
Model 2: ynaffair ~ gender + age + yearsmarried + children +
    religiousness + education + occupation + rating
  Resid. Df Resid. Dev Df Deviance P(>|Chi|)
1       596        615
2       592        610  4     5.85      0.21
```

结果的卡方值不显著（p=0.21），表明四个预测变量的新模型与九个完整预测变量的模型拟合程度一样好。这使得你更加坚信添加性别、孩子、学历和职业变量不会显著提高方程的预测精度，因此可以依据更简单的模型进行解释。

13.2.1　解释模型参数

先看看回归系数：

```
> coef(fit.reduced)
  (Intercept)           age  yearsmarried religiousness        rating
        1.931        -0.035         0.101        -0.329        -0.461
```

在Logistic回归中，响应变量是Y=1的对数优势比（log）。回归系数含义是当其他预测变量不变时，一单位预测变量的变化可引起的响应变量对数优势比的变化。

由于对数优势比解释性差，你可对结果进行指数化：

```
> exp(coef(fit.reduced))
  (Intercept)           age  yearsmarried religiousness        rating
        6.895         0.965         1.106         0.720         0.630
```

可以看到婚龄增加一年，婚外情的优势比将乘以1.106（保持年龄、宗教信仰和婚姻评定不变）；相反，年龄增加一岁，婚外情的的优势比则乘以0.965。因此，随着婚龄的增加和年龄、宗教信仰与婚姻评分的降低，婚外情优势比将上升。因为预测变量不能等于0，截距项在此处没有什么特定含义。

如果有需要，你还可使用confint()函数获取系数的置信区间。例如，exp(confint(fit.reduced))可在优势比尺度上得到系数95%的置信区间。

最后，预测变量一单位的变化可能并不是我们最想关注的。对于二值型Logistic回归，某预测变量n单位的变化引起的较高值上优势比的变化为exp(β_j)^n，它反映的信息可能更为重要。比如，保持其他预测变量不变，婚龄增加一年，婚外情的优势比将乘以1.106，而如果婚龄增加10年，优势比将乘以1.106^10，即2.7。

13.2.2 评价预测变量对结果概率的影响

对于我们大多数人来说，以概率的方式思考比使用优势比更直观。使用predict()函数，你可观察某个预测变量在各个水平时对结果概率的影响。首先创建一个包含你感兴趣预测变量值的虚拟数据集，然后对该数据集使用predict()函数，以预测这些值的结果概率。

现在我们使用该方法评价婚姻评分对婚外情概率的影响。首先，创建一个虚拟数据集，设定年龄、婚龄和宗教信仰为它们的均值，婚姻评分的范围为1～5。

```
> testdata <- data.frame(rating=c(1, 2, 3, 4, 5), age=mean(Affairs$age),
                         yearsmarried=mean(Affairs$yearsmarried),
                         religiousness=mean(Affairs$religiousness))
> testdata
  rating  age yearsmarried religiousness
1      1 32.5         8.18          3.12
2      2 32.5         8.18          3.12
3      3 32.5         8.18          3.12
4      4 32.5         8.18          3.12
5      5 32.5         8.18          3.12
```

接下来，使用测试数据集预测相应的概率：

```
> testdata$prob <- predict(fit.reduced, newdata=testdata, type="response")
  testdata
  rating  age yearsmarried religiousness  prob
1      1 32.5         8.18          3.12 0.530
2      2 32.5         8.18          3.12 0.416
3      3 32.5         8.18          3.12 0.310
4      4 32.5         8.18          3.12 0.220
5      5 32.5         8.18          3.12 0.151
```

从这些结果可以看到，当婚姻评分从1（很不幸福）变为5（非常幸福）时，婚外情概率从0.53降低到了0.15（假定年龄、婚龄和宗教信仰不变）。下面我们再看看年龄的影响：

```
> testdata <- data.frame(rating=mean(Affairs$rating),
                         age=seq(17, 57, 10),
                         yearsmarried=mean(Affairs$yearsmarried),
                         religiousness=mean(Affairs$religiousness))
> testdata
  rating age yearsmarried religiousness
1   3.93  17         8.18          3.12
2   3.93  27         8.18          3.12
3   3.93  37         8.18          3.12
4   3.93  47         8.18          3.12
5   3.93  57         8.18          3.12

> testdata$prob <- predict(fit.reduced, newdata=testdata, type="response")
```

```
> testdata
  rating age yearsmarried religiousness    prob
1   3.93  17         8.18          3.12   0.335
2   3.93  27         8.18          3.12   0.262
3   3.93  37         8.18          3.12   0.199
4   3.93  47         8.18          3.12   0.149
5   3.93  57         8.18          3.12   0.109
```

此处可以看到，当其他变量不变，年龄从17增加到57时，婚外情的概率将从0.34降低到0.11。利用该方法，你可探究每一个预测变量对结果概率的影响。

13.2.3　过度离势

抽样于二项分布的数据的期望方差是 $\sigma^2 = n\pi(1-\pi)$，n为观测数，π为属于Y = 1组的概率。所谓过度离势，即观测到的响应变量的方差大于期望的二项分布的方差。过度离势会导致奇异的标准误检验和不精确的显著性检验。

当出现过度离势时，仍可使用`glm()`函数拟合Logistic回归，但此时需要将二项分布改为类二项分布（quasibinomial distribution）。

检测过度离势的一种方法是比较二项分布模型的残差偏差与残差自由度，如果比值：

$$\Phi = \frac{\text{残差偏差}}{\text{残差自由度}}$$

比1大很多，你便可认为存在过度离势。回到婚外情的例子，可得：

$$\Phi = \frac{\text{残差偏差}}{\text{残差自由度}} = \frac{615.36}{596} = 1.03$$

它非常接近于1，表明没有过度离势。

你还可以对过度离势进行检验。为此，你需要拟合模型两次，第一次使用`family = "binomial"`，第二次使用`family = "quasibinomial"`。假设第一次`glm()`返回对象记为`fit`，第二次返回对象记为`fit.od`，那么：

```
pchisq(summary(fit.od)$dispersion * fit$df.residual,
       fit$df.residual, lower = F)
```

提供的p值即可对零假设H0：$\Phi = 1$ 与备择假设H1：$\Phi \neq 1$进行检验。若p很小（小于0.05），你便可拒绝零假设。

将其应用到婚外情数据集，可得：

```
> fit <- glm(ynaffair ~ age + yearsmarried + religiousness +
             rating, family = binomial(), data = Affairs)
> fit.od <- glm(ynaffair ~ age + yearsmarried + religiousness +
                rating, family = quasibinomial(), data = Affairs)
> pchisq(summary(fit.od)$dispersion * fit$df.residual,
         fit$df.residual, lower = F)

[1] 0.34
```

此处p值（0.34）显然不显著（$p > 0.05$），这更增强了我们认为不存在过度离势的信心。下节

介绍泊松回归时，我们仍将对过度离势问题进行讨论。

13.2.4 扩展

R中扩展的Logistic回归和变种如下所示。

- **稳健Logistic回归** robust包中的glmRob()函数可用来拟合稳健的广义线性模型，包括稳健Logistic回归。当拟合Logistic回归模型数据出现离群点和强影响点时，稳健Logistic回归便可派上用场。
- **多项分布回归** 若响应变量包含两个以上的无序类别（比如，已婚/寡居/离婚），便可使用mlogit包中的mlogit()函数拟合多项Logistic回归。
- **序数Logistic回归** 若响应变量是一组有序的类别（比如，信用风险为差/良/好），便可使用rms包中的lrm()函数拟合序数Logistic回归。

可对多类别的响应变量（无论是否有序）进行建模是非常重要的扩展，但它也面临着解释性更复杂的困难。同时，在这种情况下评价模型拟合优度和回归诊断也变得更为复杂。

在婚外情的例子中，婚外偷腥的次数被二值化为一个“是/否”的响应变量，这是因为我们最感兴趣的是在过去一年中调查对象是否有过一次婚外情。如果兴趣转移到量上（过去一年中婚外情的次数），便可直接对计数型数据进行分析。分析计数型数据的一种流行方法是泊松回归，这便是我们接下来的话题。

13.3 泊松回归

当通过一系列连续型和/或类别型预测变量来预测计数型结果变量时，泊松回归是一个非常有用的工具。一个全面而易懂的泊松回归简介参见Coxe、West和Aiken的“The Analysis of Count Data: A Gentle Introduction to Poisson Regression and Its Alternatives”（2009）。

为阐述泊松回归模型的拟合过程，并探讨一些可能出现的问题，我们将使用robust包中的Breslow癫痫数据（Breslow，1993）。特别地，我们将讨论在治疗初期的八周内，抗癫痫药物对癫痫发病数的影响。继续下文前，请确定已安装robust包。

我们就遭受轻微或严重间歇性癫痫的病人的年龄和癫痫发病数收集了数据，包含病人被随机分配到药物组或者安慰剂组前八周和随机分配后八周两种情况。响应变量为sumY（随机化后八周内癫痫发病数），预测变量为治疗条件（Trt）、年龄（Age）和前八周内的基础癫痫发病数（Base）。之所以包含基础癫痫发病数和年龄，是因为它们对响应变量有潜在影响。在解释这些协变量后，我们感兴趣的是药物治疗是否能减少癫痫发病数。

首先，看看数据集的统计汇总信息：

```
> data(breslow.dat, package="robust")
> names(breslow.dat)
 [1] "ID"    "Y1"    "Y2"    "Y3"    "Y4"    "Base"  "Age"   "Trt"   "Ysum"
[10] "sumY"  "Age10" "Base4"

> summary(breslow.dat[c(6,7,8,10)])
```

```
      Base            Age              Trt          sumY
 Min.   :  6.0   Min.   :18.0   placebo  :28   Min.   :  0.0
 1st Qu.: 12.0   1st Qu.:23.0   progabide:31   1st Qu.: 11.5
 Median : 22.0   Median :28.0                  Median : 16.0
 Mean   : 31.2   Mean   :28.3                  Mean   : 33.1
 3rd Qu.: 41.0   3rd Qu.:32.0                  3rd Qu.: 36.0
 Max.   :151.0   Max.   :42.0                  Max.   :302.0
```

注意，虽然数据集有12个变量，但是我们只关注之前描述的四个变量。基础和随机化后的癫痫发病数都有很高的偏度。现在，我们更详细地考察响应变量。如下代码可生成的图形如图13-1所示。

```
opar <- par(no.readonly=TRUE)
par(mfrow=c(1,2))
attach(breslow.dat)
hist(sumY, breaks=20, xlab="Seizure Count",
     main="Distribution of Seizures")
boxplot(sumY ~ Trt, xlab="Treatment", main="Group Comparisons")
par(opar)
```

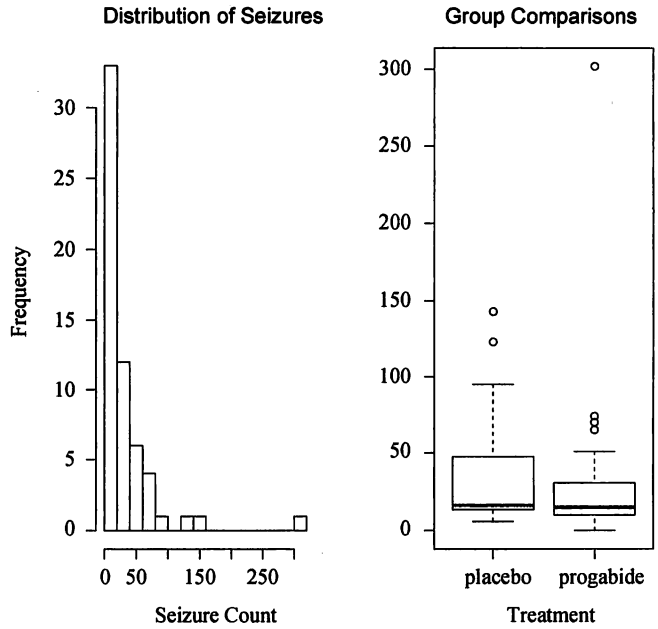


图13-1　随机化后的癫痫发病数的分布情况（来源：Breslow癫痫数据）

从图13-1中可以清楚地看到因变量的偏倚特性以及可能的离群点。初看图形时，药物治疗下癫痫发病数似乎变小了，且方差也变小了（泊松分布中，较小的方差伴随着较小的均值）。与标准最小二乘回归不同，泊松回归并不关注方差异质性。

接下来拟合泊松回归：

```
> fit <- glm(sumY ~ Base + Age + Trt, data=breslow.dat, family=poisson())
> summary(fit)

Call:
glm(formula = sumY ~ Base + Age + Trt, family = poisson(), data = breslow.
  dat)

Deviance Residuals:
   Min      1Q  Median      3Q     Max
-6.057  -2.043  -0.940   0.793  11.006

Coefficients:
              Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)   1.948826   0.135619   14.37  < 2e-16 ***
Base          0.022652   0.000509   44.48  < 2e-16 ***
Age           0.022740   0.004024    5.65  1.6e-08 ***
Trtprogabide -0.152701   0.047805   -3.19   0.0014 **
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for poisson family taken to be 1)

    Null deviance: 2122.73  on 58  degrees of freedom
Residual deviance:  559.44  on 55  degrees of freedom
AIC: 850.7

Number of Fisher Scoring iterations: 5
```

输出结果列出了偏差、回归参数、标准误和参数为0的检验。注意，此处预测变量在$p<0.05$的水平下都非常显著。

13.3.1 解释模型参数

使用coef()函数可获取模型系数，或者调用summary()函数的输出结果中的Coefficients表格：

```
> coef(fit)
 (Intercept)        Base         Age Trtprogabide
      1.9488      0.0227      0.0227      -0.1527
```

在泊松回归中，因变量以条件均值的对数形式ln(λ)来建模。年龄的回归参数为0.0227，表明保持其他预测变量不变，年龄增加一岁，癫痫发病数的对数均值将相应增加0.03。截距项即当预测变量都为0时，癫痫发病数的对数均值。由于不可能为0岁，且调查对象的基础癫痫发病数均不为0，因此本例中截距项没有意义。

通常在因变量的初始尺度（癫痫发病数，而非发病数的对数）上解释回归系数比较容易。为此，指数化系数：

```
> exp(coef(fit))
 (Intercept)        Base         Age Trtprogabide
       7.020       1.023       1.023        0.858
```

现在可以看到，保持其他变量不变，年龄增加一岁，期望的癫痫发病数将乘以1.023。这意

味着年龄的增加与较高的癫痫发病数相关联。更为重要的是，一单位Trt的变化（即从安慰剂到治疗组），期望的癫痫发病数将乘以0.86，也就是说，保持基础癫痫发病数和年龄不变，服药组相对于安慰剂组癫痫发病数降低了20%。

另外需要牢记的是，与Logistic回归中的指数化参数相似，泊松模型中的指数化参数对响应变量的影响都是成倍增加的，而不是线性相加。同样，你还需要评价泊松模型的过度离势。

13.3.2　过度离势

泊松分布的方差和均值相等。当响应变量观测的方差比依据泊松分布预测的方差大时，泊松回归可能发生过度离势。由于处理计数型数据时经常发生过度离势，且过度离势会对结果的可解释性造成负面影响，因此我们需要花些时间讨论该问题。

可能发生过度离势的原因有如下几个（Coxe et al.，2009）。

- 遗漏了某个重要的预测变量。
- 可能因为事件相关。在泊松分布的观测中，计数中每次事件都被认为是独立发生的。以癫痫数据为例，这意味着对于任何病人，每次癫痫发病的概率与其他癫痫发病的概率相互独立。但是这个假设通常都无法满足。对于某个的病人，在已知他已经发生了39次癫痫时，第一次发生癫痫的概率不可能与第40次发生癫痫的概率相同。
- 在纵向数据分析中，重复测量的数据由于内在群聚特性可导致过度离势。此处并不讨论纵向泊松模型。

如果存在过度离势，在模型中你无法进行解释，那么可能会得到很小的标准误和置信区间，并且显著性检验也过于宽松（也就是说，你将会发现并不真实存在的效应）。

与Logistic回归类似，此处如果残差偏差与残差自由度的比例远远大于1，那么表明存在过度离势。对于癫痫数据，它的比例为：

$$\frac{\text{残差偏差}}{\text{残差自由度}}=\frac{559.44}{55}=10.17$$

很显然，比例远远大于1。

qcc包提供了一个对泊松模型过度离势的检验方法。（在首次使用前，请确保已经下载和安装此包。）如下代码可进行癫痫数据过度离势的检验：

```
> library(qcc)
> qcc.overdispersion.test(breslow.dat$sumY, type="poisson")

Overdispersion test Obs.Var/Theor.Var Statistic p-value
       poisson data              62.9      3646       0
```

意料之中，显著性检验的p值果然小于0.05，进一步表明确实存在过度离势。

通过用family = "quasipoisson"替换family = "poisson"，你仍然可以使用glm()函数对该数据进行拟合。这与Logistic回归处理过度离势的方法是相同的。

```
> fit.od <- glm(sumY ~ Base + Age + Trt, data=breslow.dat,
                family=quasipoisson())
```

```
> summary(fit.od)

Call:
glm(formula = sumY ~ Base + Age + Trt, family = quasipoisson(),
    data = breslow.dat)

Deviance Residuals:
   Min      1Q  Median      3Q     Max
-6.057  -2.043  -0.940   0.793  11.006

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)   1.94883    0.46509    4.19  0.00010 ***
Base          0.02265    0.00175   12.97  < 2e-16 ***
Age           0.02274    0.01380    1.65  0.10509
Trtprogabide -0.15270    0.16394   -0.93  0.35570
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for quasipoisson family taken to be 11.8)

    Null deviance: 2122.73  on 58  degrees of freedom
Residual deviance:  559.44  on 55  degrees of freedom
AIC: NA

Number of Fisher Scoring iterations: 5
```

注意，使用类泊松（quasi-Poisson）方法所得的参数估计与泊松方法相同，但标准误变大了许多。此处，标准误越大将会导致Trt（和Age）的p值越大于0.05。当考虑过度离势，并控制基础癫痫数和年龄时，并没有充足的证据表明药物治疗相对于使用安慰剂能显著降低癫痫发病次数。

不过请记住，本例只是用于阐释泊松模型，它的结果并不能用来反映真实世界中的普罗加比（治疗癫痫）的药效问题。我不是医生（至少不是一个药剂师），也未在电视中扮演过这类角色，数据只是用来阐释模型的。

最后，我们以探究泊松回归的一些重要变种和扩展结束本节。

13.3.3 扩展

R提供了基本泊松回归模型的一些有用扩展，包括允许时间段变化、存在过多0时会自动修正的模型，以及当数据存在离群点和强影响点时有用的稳健模型。下面分别对它们进行介绍。

1. 时间段变化的泊松回归

对于泊松回归的讨论，我们一直将响应变量局限在一个固定长度时间段中进行测量（例如，八周内的癫痫发病数、过去一年内交通事故数、一天中亲近社会的举动次数），整个观测集中时间长度都是不变的。不过，你也可以拟合允许时间段变化的泊松回归模型。此处假设结果变量是一个比率。

为分析比率，必须包含一个记录每个观测的时间长度的变量（如time）。然后，将模型从：

$$\ln(\lambda) = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j X_j$$

修改为：

$$\ln\left(\frac{\lambda}{time}\right) = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j X_j$$

或等价的：

$$\ln(\lambda) = \ln(time) + \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j X_j$$

为拟合新模型，你需要使用`glm()`函数中的`offset`选项。例如在Breslow癫痫研究中，假设病人随机分组后检测的时间长度在14天到60天间变化。你可以将癫痫发病率作为因变量（假设已记录了每个病人发病的时间），然后拟合模型：

```
fit <- glm(sumY ~ Base + Age + Trt, data=breslow.dat,
           offset= log(time), family=poisson())
```

其中`sumY`指随机化分组后在每个病人被研究期间其癫痫发病的次数。此处假定比率不随时间变化（比如，4天中发生2次癫痫与20天发生10次癫痫比率相同）。

2. 零膨胀的泊松回归

在一个数据集中，0计数的数目时常比用泊松模型预测的数目多。当总体的一个子群体无任何被计数的行为时，就可能发生这种问题。以Logistic回归中的婚外情数据为例，初始结果变量（`affairs`）记录了调查对象在过去一年中的婚外偷腥次数。在整个调查期间，很有可能有一群对配偶忠诚的群体从未有过婚外情。这便称为*结构零值*（相对于调查中那群有婚外情的人）。

此时，你可以使用*零膨胀的泊松回归*（zero-inflated Poisson regression）分析该数据。它将同时拟合两个模型：一个用来预测哪些人又会发生婚外情，另外一个用来预测排除了婚姻忠诚者后的调查对象会发生多少次婚外情。你可以把该模型看做Logistic回归（预测结构零值）和泊松回归（预测无结构零值观测的计数）的组合。`pscl`包中的`zeroinfl()`函数可做零膨胀泊松回归。

3. 稳健泊松回归

`robust`包中的`glmRob()`函数可以拟合稳健广义线性模型，包含稳健泊松回归。正如上文所提到的，当存在离群点和强影响点时，该方法会很有效。

深入探究

广义线性模型是一种数学上的复杂模型，有许多可用的学习资源。Dunteman和Ho的*An Introduction to Generalized Linear Models*（2006）是一个较好的简介，可供参考；McCullagh和Nelder的*Generalized Linear Models, Second Edition*（1989）则是经典的广义线性模型的（高级）材料。Dobson和Barnett的*An Introduction to Generalized Linear Models, Third Edition*（2008）和Fox的*Applied Regression Analysis and Generalized Linear Models*（2008）给出了一个全面而易懂的讲义，另外还有以R为背景的优秀简介可参考：Faraway (2006)和Fox (2002)。

13.4 小结

为帮助你更好地理解数据，本章使用广义线性模型扩展了经典方法的方法适用范围。具体来讲，该框架可以用来分析非正态的响应变量，包括分类数据和离散的计数型数据。在简短介绍了这些通用方法后，我们重点探究了Logistic回归（分析二值型结果变量）和泊松回归（分析计数型或比率结果变量）。

随后，我们讨论了过度离势问题，包括如何检测以及依据它进行调整等方法。最后，学习了它们在R中的一些可用扩展和变种。

到目前为止，我们介绍的每种统计方法都是直接处理可观测的和可记录的变量。在下一章中，我们将看看处理潜变量的统计模型，即处理那些你坚信存在并能解释可观测变量的无法被观测到的、理论上的变量。具体而言，你将学习如何使用因子分析方法检测和检验这些无法被观测到的变量的假设。

第 14 章 主成分和因子分析

本章内容

- 主成分分析
- 探索性因子分析
- 其他潜变量模型

信息过度复杂是多变量数据最大的挑战之一。若数据集有100个变量，如何了解其中所有的交互关系呢？即使只有20个变量，当试图理解各个变量与其他变量的关系时，也需要考虑190对相互关系。主成分分析和探索性因子分析是两种用来探索和简化多变量复杂关系的常用方法，它们之间有联系也有区别。

主成分分析（PCA）是一种数据降维技巧，它能将大量相关变量转化为一组很少的不相关变量，这些无关变量称为主成分。例如，使用PCA可将30个相关（很可能冗余）的环境变量转化为5个无关的成分变量，并且尽可能地保留原始数据集的信息。

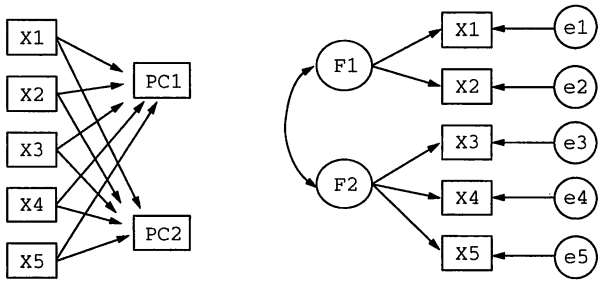
相对而言，探索性因子分析（EFA）是一系列用来发现一组变量的潜在结构的方法。它通过寻找一组更小的、潜在的或隐藏的结构来解释已观测到的、显式的变量间的关系。例如，`Harman74.cor`包含了24个心理测验间的相互关系，受试对象为145个七年级或八年级的学生。假使应用EFA来探索该数据，结果表明276个测验间的相互关系可用四个学生能力的潜在因子（语言能力、反应速度、推理能力和记忆能力）来进行解释。

PCA与EFA模型间的区别参见图14-1。主成分（PC1和PC2）是观测变量（X1到X5）的线性组合。形成线性组合的权重都是通过最大化各主成分所解释的方差来获得，同时还要保证个主成分间不相关。

相反，因子（F1和F2）被当做是观测变量的结构基础或“原因”，而不是它们的线性组合。代表观测变量方差的误差（e1到e5）无法用因子来解释。图中的圆圈表示因子和误差无法直接观测，但是可通过变量间的相互关系推导得到。在本例中，因子间带曲线的箭头表示它们之间有相关性。在EFA模型中，相关因子是常见的，但并不是必需的。

本章介绍的两种方法都需要大样本来支撑稳定的结果，但是多大样本量才足够也是一个复杂的问题。目前，数据分析师常使用经验法则：“因子分析需要5～10倍于变量数的样本数。”最近研究表明，所需样本量依赖于因子数目、与各因子相关联的变量数，以及因子对变量方差的解释程度（Bandalos & Boehm-Kaufman，2009）。我将冒险推测一下：如果你有几百个观测，样本量

便已充足。本章中，为保证输出结果（和篇幅原因）可控性，我们将人为设定一些小问题。



(a) 主成分分析模型　　(b) 因子分析模型

图14-1　主成分分析和因子分析模型。图中展示了可观测变量（X1到X5）、主成分（PC1、PC2）、因子（F1、F2）和误差（e1到e5）

首先，我们将回顾R中可用来做PCA或EFA的函数，并简略看一看相关分析流程。然后，逐步分析两个PCA示例，以及一个扩展的EFA示例。最后，本章简要列出R中其他拟合潜变量模型的软件包，包括用于验证性因子分析、结构方程模型、对应分析和潜在类别分析的软件包。

14.1 R中的主成分和因子分析

R的基础安装包提供了PCA和EFA的函数，分别为`princomp()`和`factanal()`。本章我们将重点介绍psych包中提供的函数。它们提供了比基础函数更丰富和有用的选项。另外，输出的结果形式也更为社会学家所熟悉，与其他统计软件如（SAS和SPSS）所提供的输出十分相似。

表14-1列出了psych包中相关度最高的函数。在使用这些函数前请确保已安装该软件包。

表14-1　psych包中有用的因子分析函数

函　数	描　述
`principal()`	含多种可选的方差旋转方法的主成分分析
`fa()`	可用主轴、最小残差、加权最小平方或最大似然法估计的因子分析
`fa.parallel()`	含平行分析的碎石图
`factor.plot()`	绘制因子分析或主成分分析的结果
`fa.diagram()`	绘制因子分析或主成分的载荷矩阵
`scree()`	因子分析和主成分分析的碎石图

初学者常会对EFA（和自由度较少的PCA）感到困惑。因为它们提供了一系列应用广泛的方法，而且每种方法都需要一些步骤（和决策）才能获得最终结果。最常见的步骤如下。

(1) *数据预处理*。PCA和EFA都根据观测变量间的相关性来推导结果。用户可以输入原始数据矩阵或者相关系数矩阵到`principal()`和`fa()`函数中。若输入初始数据，相关系数矩阵将会被自动计算，在计算前请确保数据中没有缺失值。

(2) *选择因子模型*。判断是PCA（数据降维）还是EFA（发现潜在结构）更符合你的研究目

标。如果选择EFA方法，你还需要选择一种估计因子模型的方法（如最大似然估计）。

(3) 判断要选择的主成分/因子数目。

(4) 选择主成分/因子。

(5) 旋转主成分/因子。

(6) 解释结果。

(7) 计算主成分或因子得分。

后面几节将从PCA开始，详细讨论分析的每一个步骤。本章最后，会给出一个详细的PCA/EFA分析流程图（图14-7）。结合相关材料，流程图能够进一步加深你对模型的理解。

14.2　主成分分析

PCA的目标是用一组较少的不相关变量代替大量相关变量，同时尽可能保留初始变量的信息，这些推导所得的变量称为主成分，它们是观测变量的线性组合。如第一主成分为：

$$PC_1 = a_1X_1 = a_2X_2 + \cdots + a_kX_k$$

它是k个观测变量的加权组合，对初始变量集的方差解释性最大。第二主成分也是初始变量的线性组合，对方差的解释性排第二，同时与第一主成分正交（不相关）。后面每一个主成分都最大化它对方差的解释程度，同时与之前所有的主成分都正交。理论上来说，你可以选取与变量数相同的主成分，但从实用的角度来看，我们都希望能用较少的主成分来近似全变量集。下面看一个简单的示例。

数据集USJudgeRatings包含了律师对美国高等法院法官的评分。数据框包含43个观测，12个变量。表14-2列出了所有的变量。

表14-2　USJudgeRatings数据集中的变量

变　量	描　述	变　量	描　述
CONT	律师与法官的接触次数	PREP	审理前的准备工作
INTG	法官正直程度	FAMI	对法律的熟稔程度
DMNR	风度	ORAL	口头裁决的可靠度
DILG	勤勉度	WRIT	书面裁决的可靠度
CFMG	案例流程管理水平	PHYS	体能
DECI	决策效率	RTEN	是否值得保留

从实用的角度来看，你是否能够用较少的变量来总结这11个变量（从INTG到RTEN）评估的信息呢？如果可以，需要多少个？如何对它们进行定义呢？因为我们的目标是简化数据，所以可使用PCA。数据保持初始得分的格式，没有缺失值。因此，下一步的决策便是判断需要多少个主成分。

14.2.1　判断主成分的个数

以下是一些可用来判断PCA中需要多少个主成分的准则：

- 根据先验经验和理论知识判断主成分数；
- 根据要解释变量方差的积累值的阈值来判断需要的主成分数；
- 通过检查变量间$k \times k$的相关系数矩阵来判断保留的主成分数。

最常见的是基于特征值的方法。每个主成分都与相关系数矩阵的特征值相关联，第一主成分与最大的特征值相关联，第二主成分与第二大的特征值相关联，依此类推。Kaiser-Harris准则建议保留特征值大于1的主成分，特征值小于1的成分所解释的方差比包含在单个变量中的方差更少。Cattell碎石检验则绘制了特征值与主成分数的图形。这类图形可以清晰地展示图形弯曲状况，在图形变化最大处之上的主成分都可保留。最后，你还可以进行模拟，依据与初始矩阵相同大小的随机数据矩阵来判断要提取的特征值。若基于真实数据的某个特征值大于一组随机数据矩阵相应的平均特征值，那么该主成分可以保留。该方法称作*平行分析*（详见Hayton、Allen和Scarpello的“Factor Retention Decisions in Exploratory Factor Analysis: A Tutorial on Parallel Analysis”，2004）。

利用`fa.parallel()`函数，你可以同时对三种特征值判别准则进行评价。对于11种评分（删去了CONT变量），代码如下：

```
library(psych)
fa.parallel(USJudgeRatings[,-1], fa="PC", n.iter=100,
            show.legend=FALSE, main="Scree plot with parallel analysis")
```

代码生成图形见图14-2，展示了基于观测特征值的碎石检验（由线段和x符号组成）、根据100个随机数据矩阵推导出来的特征值均值（虚线），以及大于1的特征值准则（y=1的水平线）。

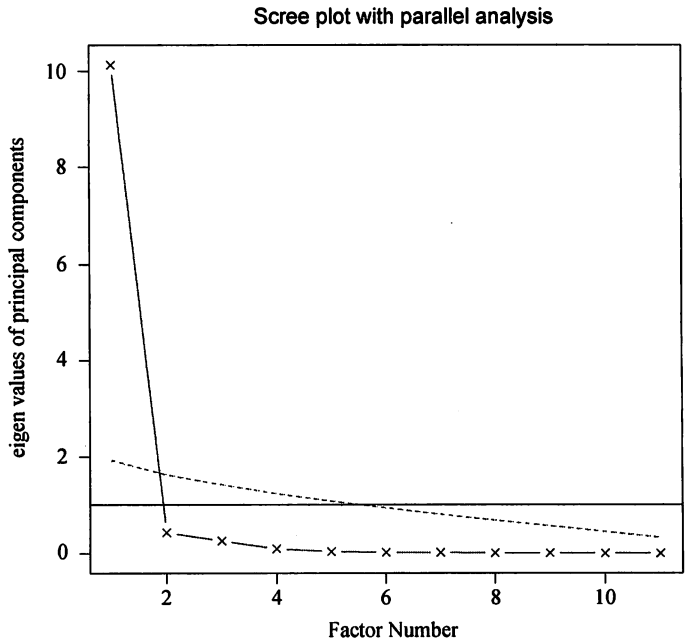


图14-2 评价美国法官评分中要保留的主成分个数。碎石图（直线与x符号）、特征值大于1准则（水平线）和100次模拟的平行分析（虚线）都表明保留一个主成分即可

三种准则表明选择一个主成分即可保留数据集的大部分信息。下一步是使用principal()函数挑选出相应的主成分。

14.2.2　提取主成分

之前已经介绍过，principal()函数可以根据原始数据矩阵或者相关系数矩阵做主成分分析。格式为：

```
principal(r, nfactors=, rotate=, scores=)
```

其中：

- *r*是相关系数矩阵或原始数据矩阵；
- nfactors设定主成分数（默认为1）；
- rotate指定旋转的方法[默认最大方差旋转（varimax），见14.2.3节]。
- scores设定是否需要计算主成分得分（默认不需要）。

使用代码清单14-1中的代码可获取第一主成分。

代码清单14-1　美国法官评分的主成分分析

```
> library(psych)
> pc <- principal(USJudgeRatings[,-1], nfactors=1)
> pc
Principal Components Analysis
Call: principal(r = USJudgeRatings[, -1], nfactors=1)
Standardized loadings based upon correlation matrix
      PC1   h2    u2
INTG 0.92 0.84 0.157
DMNR 0.91 0.83 0.166
DILG 0.97 0.94 0.061
CFMG 0.96 0.93 0.072
DECI 0.96 0.92 0.076
PREP 0.98 0.97 0.030
FAMI 0.98 0.95 0.047
ORAL 1.00 0.99 0.009
WRIT 0.99 0.98 0.020
PHYS 0.89 0.80 0.201
RTEN 0.99 0.97 0.028

                  PC1
SS loadings     10.13
Proportion Var   0.92
[……已删除额外输出……]
```

此处，你输入的是没有CONT变量的原始数据，并指定获取一个未旋转（参见14.3.3节）的主成分。由于PCA只对相关系数矩阵进行分析，在获取主成分前，原始数据将会被自动转换为相关系数矩阵 。

PC1栏包含了成分载荷，指观测变量与主成分的相关系数。如果提取不止一个主成分，那么还将会有PC2、PC3等栏。成分载荷（component loadings）可用来解释主成分的含义。此处可以

看到，第一主成分（PC1）与每个变量都高度相关，也就是说，它是一个可用来进行一般性评价的维度。

h2栏指成分公因子方差——主成分对每个变量的方差解释度。u2栏指成分唯一性——方差无法被主成分解释的比例（1-h2）。例如，体能（PHYS）80%的方差都可用第一主成分来解释，20%不能。相比而言，PHYS是用第一主成分表示性最差的变量。

SS loadings行包含了与主成分相关联的特征值，指的是与特定主成分相关联的标准化后的方差值（本例中，第一主成分的值为10）。最后，Proportion Var行表示的是每个主成分对整个数据集的解释程度。此处可以看到，第一主成分解释了11个变量92%的方差。

让我们再来看看第二个例子，它的结果不止一个主成分。Harman23.cor数据集包含305个女孩的8个身体测量指标。本例中，数据集由变量的相关系数组成，而不是原始数据集（见表14-3）。

表14-3 305个女孩的身体指标间的相关系数（Harman23.cor）

	身高	指距	前臂	小腿	体重	股骨转子间径	胸围	胸宽
身高	1.00	0.85	0.80	0.86	0.47	0.40	0.30	0.38
指距	0.85	1.00	0.88	0.83	0.38	0.33	0.28	0.41
前臂	0.80	0.88	1.00	0.80	0.38	0.32	0.24	0.34
小腿	0.86	0.83	0.80	1.00	0.44	0.33	0.33	0.36
体重	0.47	0.38	0.38	0.44	1.00	0.76	0.73	0.63
股骨转子间径	0.40	0.33	0.32	0.33	0.76	1.00	0.58	0.58
胸围	0.30	0.28	0.24	0.33	0.73	0.58	1.00	0.54
胸宽	0.38	0.41	0.34	0.36	0.63	0.58	0.54	1.00

* 来源：Harman, H. H. (1976) *Modern Factor Analysis, Third Edition Revised*, University of Chicago Press, Table 2.3

同样地，我们希望用较少的变量替换这些原始身体指标。如下代码可判断要提取的主成分数。此处，你需要填入相关系数矩阵（Harman23.cor对象中的cov部分），并设定样本大小（n.obs）：

```
library(psych)
fa.parallel(Harman23.cor$cov, n.obs=302, fa="pc", n.iter=100,
            show.legend=FALSE, main="Scree plot with parallel analysis")
```

结果见图14-3。

与第一个例子类似，图形中的Kaiser-Harris准则、碎石检验和平行分析都建议选择两个主成分。但是三个准备并不总是相同，你可能需要依据实际情况提取不同数目的主成分，选择最优解决方案。代码清单清单14-2从相关系数矩阵中提取了前两个主成分。

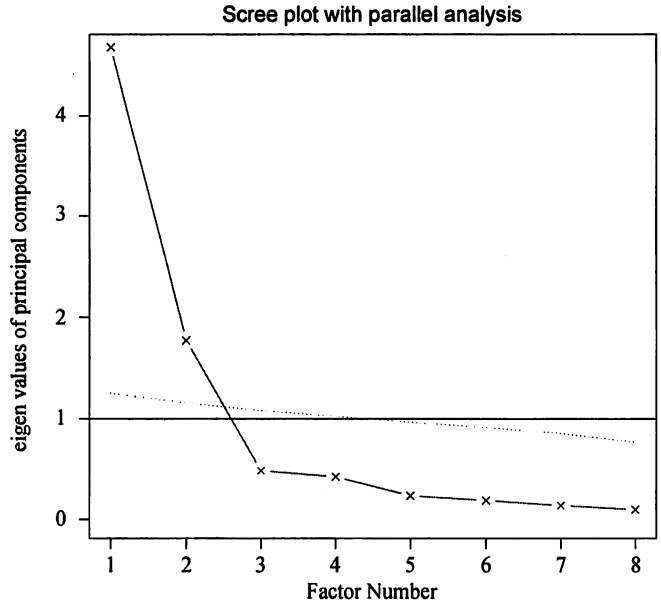


图14-3　判断身体测量数据集所需的主成分数。碎石图（直线和x符号）、特征值大于1准则（水平线）和100次模拟的平行分析建议保留两个主成分

代码清单14-2　身体测量指标的主成分分析

```
> library(psych)
> PC <- principal(Harman23.cor$cov, nfactors=2, rotate="none")
> PC

Principal Components Analysis
Call: principal(r = Harman23.cor$cov, nfactors = 2, rotate = "none")
Standardized loadings based upon correlation matrix
                 PC1   PC2   h2    u2
height          0.86 -0.37 0.88 0.123
arm.span        0.84 -0.44 0.90 0.097
forearm         0.81 -0.46 0.87 0.128
lower.leg       0.84 -0.40 0.86 0.139
weight          0.76  0.52 0.85 0.150
bitro.diameter  0.67  0.53 0.74 0.261
chest.girth     0.62  0.58 0.72 0.283
chest.width     0.67  0.42 0.62 0.375

                 PC1  PC2
SS loadings     4.67 1.77
Proportion Var  0.58 0.22
Cumulative Var  0.58 0.81
```

[……已删除额外输出……]

从代码清单14-2中的PC1和PC2栏可以看到，第一主成分解释了身体测量指标58%的方差，而第二主成分解释了22%，两者总共解释了81%的方差。对于高度变量，两者则共解释了其88%的方差。

载荷阵解释了成分和因子的含义。第一主成分与每个身体测量指标都正相关，看起来似乎是一个一般性的衡量因子；第二主成分与前四个变量（height、arm.span、forearm和lower.leg）负相关，与后四个变量（weight、bitro.diameter、chest.girth和chest.width）正相关，因此它看起来似乎是一个长度-容量因子。但理念上的东西都不容易构建，当提取了多个成分时，对它们进行旋转可使结果更具解释性，接下来我们便讨论该问题。

14.2.3 主成分旋转

旋转是一系列将成分载荷阵变得更容易解释的数学方法，它们尽可能地对成分去噪。旋转方法有两种：使选择的成分保持不相关（*正交旋转*），和让它们变得相关（*斜交旋转*）。旋转方法也会依据去噪定义的不同而不同。最流行的正交旋转是*方差极大旋转*，它试图对载荷阵的列进行去噪，使得每个成分只是由一组有限的变量来解释（即载荷阵每列只有少数几个很大的载荷，其他都是很小的载荷）。对身体测量数据使用方差极大旋转，你可以得到如代码清单14-3所示的结果。14.4节将介绍斜交旋转的示例。

代码清单14-3 方差极大旋转的主成分分析

```
> rc <- principal(Harman23.cor$cov, nfactors=2, rotate="varimax")
> rc

Principal Components Analysis
Call: principal(r = Harman23.cor$cov, nfactors = 2, rotate = "varimax")
Standardized loadings based upon correlation matrix
                RC1  RC2   h2    u2
height         0.90 0.25 0.88 0.123
arm.span       0.93 0.19 0.90 0.097
forearm        0.92 0.16 0.87 0.128
lower.leg      0.90 0.22 0.86 0.139
weight         0.26 0.88 0.85 0.150
bitro.diameter 0.19 0.84 0.74 0.261
chest.girth    0.11 0.84 0.72 0.283
chest.width    0.26 0.75 0.62 0.375

                RC1  RC2
SS loadings    3.52 2.92
Proportion Var 0.44 0.37
Cumulative Var 0.44 0.81
```

[……已删除额外输出……]

列的名字都从PC变成了RC，以表示成分被旋转。观察RC1栏的载荷，你可以发现第一主成分主要由前四个变量来解释（长度变量）。RC2栏的载荷表示第二主成分主要由变量5到变量8来解释（容量变量）。注意两个主成分仍不相关，对变量的解释性不变，这是因为变量的群组没有发生变化。另外，两个主成分旋转后的累积方差解释性没有变化（81%），变的只是各个主成分对方差的解释度（成分1从58%变为44%，成分2从22%变为37%）。各成分的方差解释度趋同，准确来说，此时应该称它们为成分而不是主成分（因为单个主成分方差最大化性质没有保留）。

我们的最终目标是用一组较少的变量替换一组较多的相关变量，因此，你还需要获取每个观测在成分上的得分。

14.2.4 获取主成分得分

在美国法官评分例子中，我们根据原始数据中的11个评分变量提取了一个主成分。利用principal()函数，你很容易获得每个调查对象在该主成分上的得分（见代码清单14-4）。

代码清单14-4　从原始数据中获取成分得分

```
> library(psych)
> pc <- principal(USJudgeRatings[,-1], nfactors=1, score=TRUE)
> head(pc$scores)
                      PC1
AARONSON,L.H.  -0.1857981
ALEXANDER,J.M.  0.7469865
ARMENTANO,A.J.  0.0704772
BERDON,R.I.     1.1358765
BRACKEN,J.J.   -2.1586211
BURNS,E.B.      0.7669406
```

当scores = TRUE时，主成分得分存储在principal()函数返回对象的scores元素中。如果有需要，你还可以获得律师与法官的接触频数与法官评分间的相关系数：

```
> cor(USJudgeRatings$CONT, PC$score)
             PC1
[1,] -0.008815895
```

显然，律师与法官的熟稔度与律师的评分毫无关联。

当主成分分析基于相关系数矩阵时，原始数据便不可用了，也不可能获取每个观测的主成分得分，但是你可以得到用来计算主成分得分的系数。

在身体测量数据中，你有各个身体测量指标间的相关系数，但是没有305个女孩的个体测量值。按照代码清单14-5，你可得到得分系数。

代码清单14-5　获取主成分得分的系数

```
> library(psych)
> rc <- principal(Harman23.cor$cov, nfactors=2, rotate="varimax")
> round(unclass(rc$weights), 2)
                 RC1   RC2
height          0.28 -0.05
arm.span        0.30 -0.08
forearm         0.30 -0.09
lower.leg       0.28 -0.06
weight         -0.06  0.33
bitro.diameter -0.08  0.32
chest.girth    -0.10  0.34
chest.width    -0.04  0.27
```

利用如下公式可得到主成分得分：

```
PC1 = 0.28*height + 0.30*arm.span + 0.30*forearm + 0.29*lower.leg -
```

```
0.06*weight - 0.08*bitro.diameter - 0.10*chest.girth -
0.04*chest.width
```

和：

```
PC2 = -0.05*height - 0.08*arm.span - 0.09*forearm - 0.06*lower.leg +
      0.33*weight + 0.32*bitro.diameter + 0.34*chest.girth +
      0.27*chest.width
```

两个等式都假定身体测量指标都已标准化（mean = 0， sd = 1）。注意，体重在PC1上的系数约为0.3或0，对于PC2也是一样。从实际角度考虑，你可以进一步简化方法，将第一主成分看做是前四个变量标准化得分的均值，类似地，将第二主成分看做是后四个变量标准化得分的均值，这正是我通常在实际中采用的方法。

“小瞬间”（Little Jiffy）征服世界

许多数据分析师都对PCA和EFA存有或多或少的疑惑。一个是历史原因，它可以追溯到一个叫做Little Jiffy的软件（不是玩笑）。Little Jiffy是因子分析早期最流行的一款软件，默认做主成分分析，选用方差极大旋转法，提取特征值大于1的成分。这款软件应用得如此广泛，以至于许多社会科学家都默认它与EFA同义。许多后来的统计软件包在它们的EFA程序中都默认如此处理。

但我希望你通过学习下一节内容发现PCA与EFA间重要的、基础性的不同之处。想更多了解PCA/EFA的混淆点，可参阅Hayton、Allen和Scarpello的“Factor Retention Decisions in Exploratory Factor Analysis: A Tutorial on Parallel Analysis”（2004）。

如果你的目标是寻求可解释观测变量的潜在隐含变量，可使用因子分析，这正是下一节的主题。

14.3 探索性因子分析

EFA的目标是通过发掘隐藏在数据下的一组较少的、更为基本的无法观测的变量，来解释一组可观测变量的相关性。这些虚拟的、无法观测的变量称作因子。（每个因子被认为可解释多个观测变量间共有的方差，因此准确来说，它们应该称作公共因子。）

模型的形式为：

$$X_i = a_1F_1 + a_2F_2 + \cdots + a_pF_p + U_i$$

其中X_i是第i个可观测变量（$i = 1 \cdots k$），F_j是公共因子（$j = 1 \cdots p$），并且$p<k$。U_i是X_i变量独有的部分（无法被公共因子解释）。a_i可认为是每个因子对复合而成的可观测变量的贡献值。回到本章开头的Harman74.cor的例子，我们认为每个个体在24个心理学测验上的观测得分，是根据四个潜在心理学因素的加权能力值组合而成。

虽然PCA和EFA存在差异，但是它们的许多分析步骤都是相似的。为阐述EFA的分析过程，我们用它来对六个心理学测验间的相关性进行分析。112个人参与了六个测验，包括非语言的普通智力测验（general）、画图测验（picture）、积木图案测验（blocks）、迷津测验（maze）、阅读测验（reading）和词汇测验（vocab）。我们如何用一组较少的、潜在的心理学因素来解释参与者的测验得分呢？

数据集ability.cov提供了变量的协方差矩阵，你可用cov2cor()函数将其转化为相关系数矩阵。数据集没有缺失值。

```
> options(digits=2)
> covariances <- ability.cov$cov
> correlations <- cov2cor(covariances)
> correlations
        general picture blocks maze reading vocab
general    1.00    0.47   0.55 0.34    0.58  0.51
picture    0.47    1.00   0.57 0.19    0.26  0.24
blocks     0.55    0.57   1.00 0.45    0.35  0.36
maze       0.34    0.19   0.45 1.00    0.18  0.22
reading    0.58    0.26   0.35 0.18    1.00  0.79
vocab      0.51    0.24   0.36 0.22    0.79  1.00
```

因为要寻求用来解释数据的潜在结构，可使用EFA方法。与使用PCA相同，下一步工作为判断需要提取几个因子。

14.3.1　判断需提取的公共因子数

用fa.parallel()函数可判断需提取的因子数：

```
> library(psych)
> covariances <- ability.cov$cov
> correlations <- cov2cor(covariances)
> fa.parallel(correlations, n.obs=112, fa="both", n.iter=100,
              main="Scree plots with parallel analysis")
```

结果见图14-4。注意，代码中使用了fa = "both"，因子图形将会同时展示主成分和公共因子分析的结果。

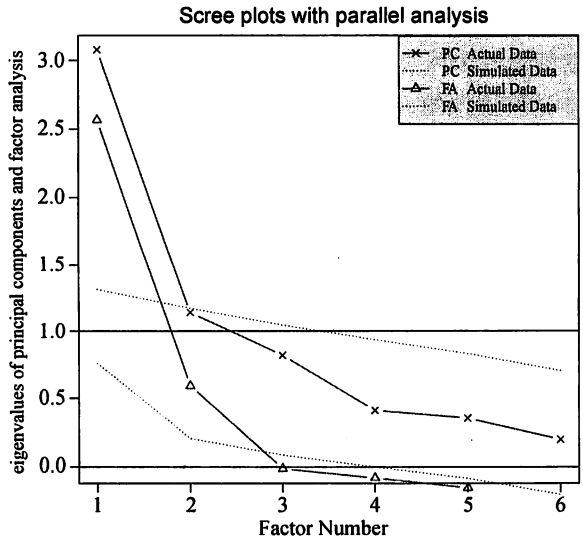


图14-4　判断心理学测验需要保留的因子数。图中同时展示了PCA和EFA的结果。PCA结果建议提取一个或者两个成分，EFA建议提取两个因子

图形中有几个值得注意的地方。如果使用PCA方法，你可能会选择一个成分（碎石检验和平行分析）或者两个成分（特征值大于1）。当摇摆不定时，高估因子数通常比低估因子数的结果好，因为高估因子数一般较少曲解“真实”情况。

观察EFA的结果，显然需提取两个因子。碎石检验的前两个特征值（三角形）都在拐角处之上，并且大于基于100次模拟数据矩阵的特征值均值。对于EFA，Kaiser-Harris准则的特征值数大于0，而不是1。（大部分人都没有意识到这一点。）图形中该准则也建议选择两个因子。

14.3.2 提取公共因子

现在你决定提取两个因子，可以使用fa()函数获得相应的结果。fa()函数的格式如下：

```
fa(r, nfactors=, n.obs=, rotate=, scores=, fm=)
```

其中：

- *r*是相关系数矩阵或者原始数据矩阵；
- nfactors设定提取的因子数（默认为1）；
- n.obs是观测数（输入相关系数矩阵时需要填写）；
- rotate设定旋转的方法（默认互变异数最小法）；
- scores设定是否计算因子得分（默认不计算）；
- fm设定因子化方法（默认极小残差法）。

与PCA不同，提取公共因子的方法很多，包括最大似然法（ml）、主轴迭代法（pa）、加权最小二乘法（wls）、广义加权最小二乘法（gls）和最小残差法（minres）。统计学家青睐使用最大似然法，因为它有良好的统计性质。不过有时候最大似然法不会收敛，此时使用主轴迭代法效果会很好。欲了解更多提取公共因子的方法，可参阅Mulaik（2009）和Corsuch（1983）。

本例使用主轴迭代法（fm = "pa"）提取未旋转的因子。结果见代码清单14-6。

代码清单14-6 未旋转的主轴迭代因子法

```
> fa <- fa(correlations, nfactors=2, rotate="none", fm="pa")
> fa
Factor Analysis using method =  pa
Call: fa(r = correlations, nfactors = 2, rotate = "none", fm = "pa")
Standardized loadings based upon correlation matrix
         PA1   PA2   h2   u2
general 0.75  0.07 0.57 0.43
picture 0.52  0.32 0.38 0.62
blocks  0.75  0.52 0.83 0.17
maze    0.39  0.22 0.20 0.80
reading 0.81 -0.51 0.91 0.09
vocab   0.73 -0.39 0.69 0.31

                PA1  PA2
SS loadings    2.75 0.83
Proportion Var 0.46 0.14
Cumulative Var 0.46 0.60
[……已删除额外输出……]
```

可以看到，两个因子解释了六个心理学测验60%的方差。不过因子载荷阵的意义并不太好解释，此时使用因子旋转将有助于因子的解释。

14.3.3　因子旋转

你可以使用正交旋转或者斜交旋转来旋转14.3.4节中两个因子的结果。现在我们同时尝试下两种方法，看看它们的异同。首先使用正交旋转（见代码清单14-7）。

代码清单14-7　用正交旋转提取因子

```
> fa.varimax <- fa(correlations, nfactors=2, rotate="varimax", fm="pa")
> fa.varimax
Factor Analysis using method =  pa
Call: fa(r = correlations, nfactors = 2, rotate = "varimax", fm = "pa")
Standardized loadings based upon correlation matrix
         PA1  PA2   h2   u2
general 0.49 0.57 0.57 0.43
picture 0.16 0.59 0.38 0.62
blocks  0.18 0.89 0.83 0.17
maze    0.13 0.43 0.20 0.80
reading 0.93 0.20 0.91 0.09
vocab   0.80 0.23 0.69 0.31

                PA1  PA2
SS loadings    1.83 1.75
Proportion Var 0.30 0.29
Cumulative Var 0.30 0.60

[……已删除额外输出……]
```

结果显示因子变得更好解释了。阅读和词汇在第一因子上载荷较大，画图、积木图案和迷宫在第二因子上载荷较大，非语言的普通智力测量在两个因子上载荷较为平均，这表明存在一个语言智力因子和一个非语言智力因子。

使用正交旋转将人为地强制两个因子不相关。如果想允许两个因子相关该怎么办呢？此时可以使用斜交转轴法，比如promax（见代码清单14-8）。

代码清单14-8　用斜交旋转提取因子

```
> fa.promax <- fa(correlations, nfactors=2, rotate="promax", fm="pa")
> fa.promax
Factor Analysis using method =  pa
Call: fa(r = correlations, nfactors = 2, rotate = "promax", fm = "pa"
Standardized loadings based upon correlation matrix
          PA1   PA2   h2   u2
general  0.36  0.49 0.57 0.43
picture -0.04  0.64 0.38 0.62
blocks  -0.12  0.98 0.83 0.17
maze    -0.01  0.45 0.20 0.80
reading  1.01 -0.11 0.91 0.09
vocab    0.84 -0.02 0.69 0.31
```

```
                PA1  PA2
SS loadings    1.82 1.76
Proportion Var 0.30 0.29
Cumulative Var 0.30 0.60

 With factor correlations of
     PA1  PA2
PA1 1.00 0.57
PA2 0.57 1.00
[……已删除额外输出……]
```

根据以上结果，你可以看出正交旋转和斜交旋转的不同之处。对于正交旋转，因子分析的重点在于**因子结构矩阵**（变量与因子的相关系数），而对于斜交旋转，因子分析会考虑三个矩阵：因子结构矩阵、因子模式矩阵和因子关联矩阵。

因子模式矩阵即标准化的回归系数矩阵。它列出了因子预测变量的权重。**因子关联矩阵**即因子相关系数矩阵。

在代码清单14-8中，PA1和PA2栏中的值组成了因子模式矩阵。它们是标准化的回归系数，而不是相关系数。注意，矩阵的列仍用来对因子进行命名（虽然此处存在一些争论）。你同样可以得到一个语言因子和一个非语言因子。

因子关联矩阵显示两个因子的相关系数为0.57，相关性很大。如果因子间的关联性很低，你可能需要重新使用正交旋转来简化问题。

因子结构矩阵（或称因子载荷阵）没有被列出来，但你可以使用公式F = P*Phi很轻松地得到它，其中F是因子载荷阵，P为因子模式矩阵，Phi为因子关联矩阵。下面的函数即可进行该乘法运算：

```
fsm <- function(oblique) {
  if (class(oblique)[2]=="fa" & is.null(oblique$Phi)) {
      warning("Object doesn't look like oblique EFA")
  } else {
      P <- unclass(oblique$loading)
      F <- P %*% oblique$Phi
      colnames(F) <- c("PA1", "PA2")
      return(F)
  }
}
```

对上面的例子使用该函数，可得：

```
> fsm(fa.promax)
         PA1  PA2
general 0.64 0.69
picture 0.33 0.61
blocks  0.44 0.91
maze    0.25 0.45
reading 0.95 0.47
vocab   0.83 0.46
```

现在你可以看到变量与因子间的相关系数。将它们与正交旋转所得因子载荷阵相比，你会发现该载荷阵列的噪音比较大，这是因为之前你允许潜在因子相关。虽然斜交方法更为复杂，但模

型将更符合真实数据。

使用factor.plot()或fa.diagram()函数，你可以绘制正交或者斜交结果的图形。来看以下代码：

```
factor.plot(fa.promax, labels=rownames(fa.promax$loadings))
```

它的生成图形见图14-5。

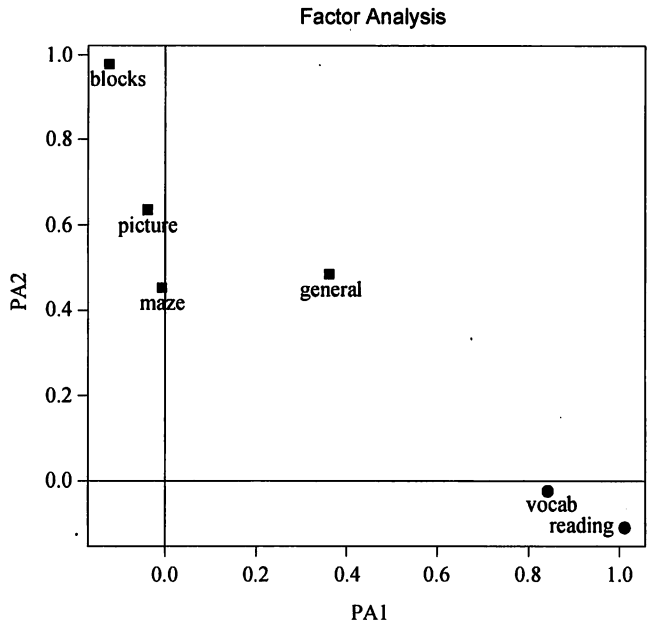


图14-5　数据集ability.cov中心理学测验的两因子图形。词汇和阅读在第一个因子（PA1）上载荷较大，而积木图案、画图和迷宫在第二个因子（PA2）上载荷较大。普通智力测验在两个因子上较为平均

代码：

```
fa.diagram(fa.promax, simple=FALSE)
```

生成的图形见图14-6。若使simple = TRUE，那么将仅显示每个因子下最大的载荷，以及因子间的相关系数。这类图形在有多个因子时十分实用。

当处理真实生活中的数据时，你不可能只对这么少的变量进行因子分析。此处只是为了操作方便，如果你想检测自己的能力，可尝试对Harman74.cor中的24个心理学测验进行因子分析。以下代码：

```
library(psych)
fa.24tests <- fa(Harman74.cor$cov, nfactors=4, rotate="promax")
```

应该是个不错的开头。

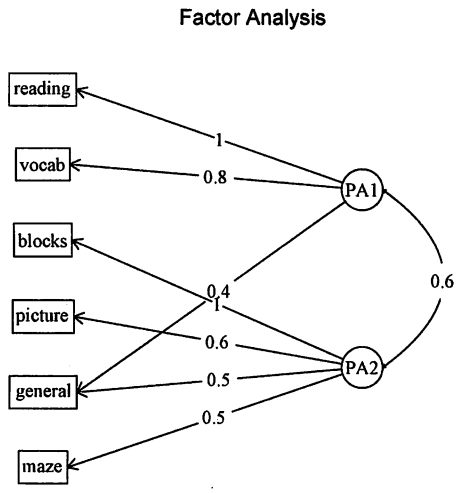


图14-6 数据集ability.cov中心理学测验的两因子斜交旋转结果图

14.3.4 因子得分

相比PCA，EFA并不那么关注计算因子得分。在fa()函数中添加score = TRUE选项（原始数据可得时）便可很轻松地获得因子得分。另外还可以得到得分系数（标准化的回归权重），它在返回对象的weights元素中。

对于ability.cov数据集，通过二因子斜交旋转法便可获得用来计算因子得分的权重：

```
> fa.promax$weights
         [,1]  [,2]
general 0.080 0.210
picture 0.021 0.090
blocks  0.044 0.695
maze    0.027 0.035
reading 0.739 0.044
vocab   0.176 0.039
```

与可精确计算的主成分得分不同，因子得分只是估计得到的。它的估计方法有多种，fa()函数使用的是回归方法。若想更多地了解因子得分，可参阅DiStefano、Zhu和Mîndrilă的“Understanding and Using Factor Scores: Considerations for the Applied Researcher”（2009）。

在继续下文之前，让我们简单了解下其他用于探索性因子分析的实用R软件包。

14.3.5 其他与EFA相关的包

R包含了其他许多对因子分析非常有用的软件包。FactoMineR包不仅提供了PCA和EFA方法，还包含潜变量模型。它有许多此处我们并没考虑的参数选项，比如数值型变量和类别型变量的使用方法。FAiR包使用遗传算法来估计因子分析模型，它增强了模型参数估计能力，能够处理不等式的约束条件，GPArotation包则提供了许多因子旋转方法。最后，还有nFactors包，

它提供了用来判断因子数目的许多复杂方法。

14.4　其他潜变量模型

EFA只是统计中一种应用广泛的潜变量模型。在结束本章之前，我们简要看看R中其他的潜变量模型，包括检验先验知识的模型、处理混合数据类型（数值型和类别型）的模型，以及仅基于类别型多因素表的模型。

在EFA中，你可以用数据来判断需要提取的因子数以及它们的含义。但是你也可以先从一些先验知识开始，比如变量背后有几个因子、变量在因子上的载荷是怎样的、因子间的相关性如何，然后通过收集数据检验这些先验知识。这种方法称作验证性因子分析（CFA）。

CFA是结构方程模型（SEM）中的一种方法。SEM不仅可以假定潜在因子的数目以及组成，还能假定因子间的影响方式。你可以将SEM看做是验证性因子分析（对变量）和回归分析（对因子）的组合，它的结果输出包含统计检验和拟合度的指标。R中有几个可做CFA和SEM的非常优秀的软件包，如sem、openMx和lavaan。

ltm包可以用来拟合测验和问卷中各项目的潜变量模型。该方法常用来创建大规模标准化测试，比如学术能力测验（SAT）和美国研究生入学考试（GRE）。

潜类别模型（潜在的因子被认为是类别型而非连续型）可通过FlexMix、lcmm、randomLCA和poLC包进行拟合。lcda包可做潜类别判别分析，而lsa可做潜在语义分析——一种自然语言处理中的方法。

ca包提供了可做简单和多重对应分析的函数。利用这些函数，可以分别在二维列联表和多维列联表中探索类别型变量的结构。

最后，R中还包含了众多的多维标度法（MDS）计算工具。所谓MDS，即可用来发现解释相似性和可测对象（如国家）间距离的潜在维度。基础安装中的cmdscale()函数可做经典的MDS，而MASS包中的isoMDS()函数可做非线性MDS。vagan包则包含了可做两种MDS的函数。

14.5　小结

本章，我们主要学习了主成分分析（PCA）和探索性因子分析（EFA）两种方法。PCA在数据降维方面非常有用，它能用一组较少的不相关变量来替代大量相关变量，进而简化分析过程。EFA包含很多方法，可用来发现一组可观测变量背后潜在的或无法观测的结构（因子）。

与PCA综合数据和降低维度的目标不同，EFA是假设生成工具，它在帮助理解众多变量间的关系时非常有用，常用于社会科学的理论研究。

虽然两种方法表面上有许多相似之处，但也有重要的差异。本章中，我们探究了这两种方法的模型，学习了判断需提取的主成分/因子数的方法、提取主成分/因子和通过旋转增强解释力的方法，以及获得主成分/因子得分的技巧。图14-7总结了PCA和EFA的分析步骤。在本章最后，我们还简单介绍了R中其他可用的潜变量模型。

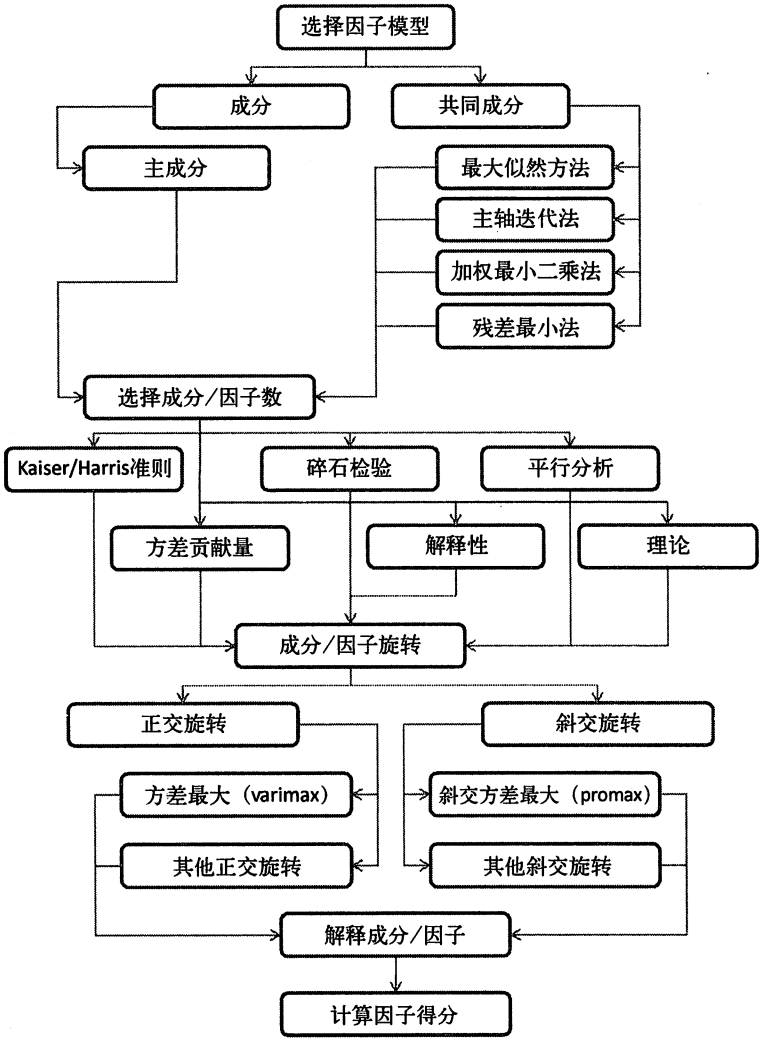


图14-7 主成分/探索性因子分析的分析步骤图

由于PCA和EFA都基于相关系数矩阵，因此在分析前去除缺失值显得非常重要。4.5节我们只是简略提到了处理缺失值的简单方法。在下一章中，我们将学习理解和处理缺失值的更完善的方法。

第15章 处理缺失数据的高级方法

本章内容

- 识别缺失数据
- 缺失数据模式的可视化
- 完整案例分析
- 缺失数据的多重插补法

在之前的章节中，我们处理的基本都是完整的数据集（即没有缺失值）。虽然这样有助于简化对统计和绘图方法的描述，但在真实世界中，缺失数据的现象是极其普遍的。

大部分人都想在一定程度上避免缺失数据造成的影响。统计教科书可能不会提及这个问题，或者仅用很少的篇幅介绍，而统计软件提供的自动处理缺失值的方法也可能不是最优的。虽然多数数据分析（至少在社会科学中）会牵涉到缺失数据，但在期刊文章的方法和结果章节却极少讨论这个问题。虽然他们会指出缺失值常常出现，并且可能导致研究结果在一定程度上无效，但公正地讲，这个问题除了在一些专业化的书籍和课程中出现，它的受重视程度还远远不够。

数据缺失有多种原因。可能是由于调查对象忘记回答一个或多个问题，或者拒绝回答敏感问题，或者感觉疲劳而没有完成一份很长的问卷，也可能是调查对象错过了约定或者过早从研究中退出，还可能是记录设备出现问题、网络连接失效、数据误记等。有时缺失数据可能是有意为之的，比如为提高调查效率或降低成本，你可能不会对所有的调查对象进行数据采集。有时数据丢失可能是由于一些未知因素。

遗憾的是，大部分统计方法都假定处理的是完整矩阵、向量和数据框。大部分情况下，在处理收集了真实数据的问题之前，你不得不消除缺失数据：(1)删除含有缺失数据的实例[1]；(2)用合理的替代值替换缺失值。不管是哪种方法，最后的结果都是没有缺失值的数据集。

本章中，我们将学习处理缺失数据的传统方法和现代方法，主要使用VIM和mice包。命令`install.packages(c("VIM","mice"))`可下载并安装这两个软件包。

为了让讨论更有意思，我们将使用VIM包提供的哺乳动物睡眠数据（`sleep`，注意不要将其与基础安装中描述药效的`sleep`数据集混淆）。数据来源于Allison和Chichetti（1976）的研究，他

① 实例是观测的另外一种叫法，本章中都将观测称作实例。——译者注

们研究了62种哺乳动物的睡眠、生态学变量和体质变量间的关系。他们对为什么动物的睡眠需求会随着物种变化很感兴趣。睡眠数据是因变量，生态学变量和体质变量是自变量或预测变量。

睡眠变量包含睡眠中做梦时长（Dream）、不做梦的时长（NonD）以及它们的和（Sleep）。体质变量包含体重（BodyWgt，单位为千克）、脑重（BrainWgt，单位为克）、寿命（Span，单位为年）和妊娠期（Gest，单位为天）。生态学变量包含物种被捕食的程度（Pred）、睡眠时暴露的程度（Exp）和面临的总危险度（Danger）。生态学变量以从1（低）到5（高）的5分制进行测量。

Allison和Chichetti的原作仅研究完整的数据，为了深入探究变量间的关系，我们将使用多重插补法对所有62个物种进行分析。

15.1 处理缺失值的步骤

刚接触缺失数据研究的读者可能会被各式各样的方法和言论弄得眼花缭乱。该领域经典的读本是Little和Rubin的*Statistical Analysis with Missing Data, Second Edition*（2002）一书。其他比较优秀的专著还有Allison的*Missing Data*（2001）、Schafer和Graham的“Missing Data: Our View of the State of the Art”（2002），以及Schlomer、Bauman和Card的“Best Practices for Missing Data Management in Counseling Psychology”（2010）。一个完整的处理方法通常包含以下几个步骤：

(1) 识别缺失数据；

(2) 检查导致数据缺失的原因；

(3) 删除包含缺失值的实例或用合理的数值代替（插补）缺失值。

但遗憾的是，仅有识别缺失数据是最清晰明确的步骤。知道数据为何缺失依赖于你对数据生成过程的理解，而决定如何处理缺失值则需要判断哪种方法的结果最为可靠和精确。

缺失数据的分类

统计学家通常将缺失数据分为三类。它们都用概率术语进行描述，但思想都非常直观。我们将用sleep研究中对做梦时长的测量（有12个动物有缺失值）来依次阐述三种类型。

(1) 完全随机缺失 若某变量的缺失数据与其他任何观测或未观测变量都不相关，则数据为完全随机缺失（MCAR）。若12个动物的做梦时长值缺失不是由于系统原因，那么可认为数据是MCAR。注意，如果每个有缺失值的变量都是MCAR，那么可以将数据完整的实例看做是对更大数据集的一个简单随机抽样。

(2) 随机缺失 若某变量上的缺失数据与其他观测变量相关，与它自己的未观测值不相关，则数据为随机缺失（MAR）。例如，体重较小的动物更可能有做梦时长的缺失值（可能因为较小的动物较难观察），“缺失”与动物的做梦时长无关，那么该数据就可以认为是MAR。此时，一旦你控制了体重变量，做梦时长数据的缺失与出现将是随机的。

(3) 非随机缺失 若缺失数据不属于MCAR或MAR，则数据为非随机缺失（NMAR）。例如，做梦时长越短的动物也更可能有做梦数据的缺失（可能由于难以测量时长较短的事件），那么数据可认为是NMAR。

大部分处理缺失数据的方法都假定数据是MCAR或MAR。此时，你可以忽略缺失数据的

生成机制，并且（在替换或删除缺失数据后）可以直接对感兴趣的关系进行建模。当数据是NMAR时，想对它进行恰当地分析比较困难，你既要对感兴趣的关系进行建模，还要对缺失值的生成机制进行建模。（目前分析NMAR数据的方法有模型选择法和模式混合法。由于NMAR数据的分析十分复杂，超出了本书的范畴，我们将忽略对它的讨论。）

处理缺失数据的方法有很多，但不能保证都生成一样的结果。图15-1列出了一系列可用来处理不完整数据的方法，以及相应的R包。

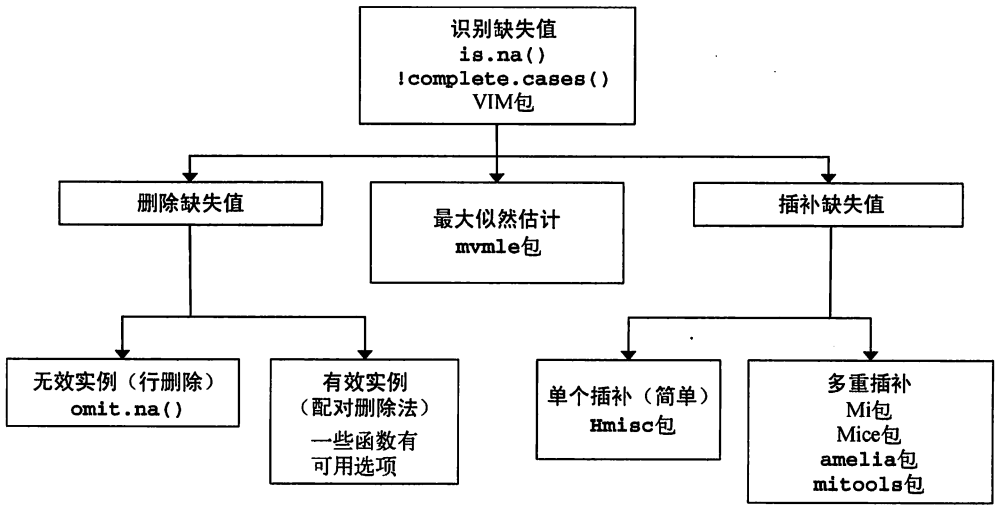


图15-1　处理不完整数据的方法，以及R中相关的包和函数

对于处理缺失数据方法的完整介绍要有一本书的篇幅才能做到。本章，我们只是学习探究缺失值模式的方法，并重点介绍三种最流行的处理不完整数据的方法（推理法、行删除法和多重插补法）。在本章最后，我们还将介绍一些在特定环境中非常有用的其他处理办法。

15.2　识别缺失值

首先，我们回顾一下4.5节的内容并地一步拓展。R使用NA（不可得）代表缺失值，NaN（不是一个数）代表不可能的值。另外，符号Inf和-Inf分别代表正无穷和负无穷。函数is.na()、is.nan()和is.infinite()可分别用来识别缺失值、不可能值和无穷值。每个返回结果都是TRUE或FALSE。表15-1给出了一些示例。

表15-1　is.na()、is.nan()和is.infinite()函数的返回值示例

x	is.na(x)	is.nan(x)	is.infinite(x)
x <- NA	TRUE	FALSE	FALSE
x <- 0 / 0	TRUE	TRUE	FALSE
x <- 1 / 0	FALSE	FALSE	TRUE

这些函数返回的对象与其自身参数的个数相同。若每个元素的类型检验通过，则由TRUE替换，否则用FALSE替换。例如，令y <- c(1, 2, 3, NA)，则is.na(y)返回向量c(FALSE, FALSE, FALSE, TRUE)。

函数complete.cases()可用来识别矩阵或数据框中没有缺失值的行。若每行都包含完整的实例，则返回TRUE的逻辑向量；若每行有一个或多个缺失值，则返回FALSE。

以睡眠数据集为例：

```
# 加载数据集
data(sleep, package="VIM")

# 列出没有缺失值的行
sleep[complete.cases(sleep),]

# 列出有一个或多个缺失值的行
sleep[!complete.cases(sleep),]
```

输出结果显示42个实例为完整数据，20个实例含一个或多个缺失值。

由于逻辑值TRUE和FALSE分别等价于数值1和0，可用sum()和mean()函数来获取关于缺失数据的有用信息。如：

```
> sum(is.na(sleep$Dream))
[1] 12
> mean(is.na(sleep$Dream))
[1] 0.19
> mean(!complete.cases(sleep))
[1] 0.32
```

结果表明变量Dream有12个缺失值，19%的实例在此变量上有缺失值。另外，数据集中32%的实例包含一个或多个缺失值。

对于识别缺失值，有两点需要牢记。第一点，complete.cases()函数仅将NA和NaN识别为缺失值，无穷值（Inf和-Inf）被当做有效值。第二点，必须使用与本章中类似的缺失值函数来识别R数据对象中的缺失值。像myvar == NA这样的逻辑比较无法实现。

现在你应该懂得了如何用程序识别缺失值，接下来学习一些有助于发现缺失值模式的工具。

15.3 探索缺失值模式

在决定如何处理缺失数据前，了解哪些变量有缺失值、数目有多少、是什么组合形式等信息非常有用。本节中，我们将介绍探索缺失值模式的图表及相关方法。最后，如果知道了数据为何缺失，这将为后续深入研究提供许多启示。

15.3.1 列表显示缺失值

你已经学习了一些识别缺失值的基本方法。比如15.2节使用complete.cases()函数列出完整的实例，或者相反，列出含一个或多个缺失值的实例。但随着数据集的增大，该方法就逐渐丧失了吸引力。此时你可以转向其他R函数。

mice包中的md.pattern()函数可生成一个以矩阵或数据框形式展示缺失值模式的表格。将函数应用到sleep数据集，可得到：

```
> library(mice)
> data(sleep, package="VIM")
> md.pattern(sleep)
   BodyWgt BrainWgt Pred Exp Danger Sleep Span Gest Dream NonD
42       1        1    1   1      1     1    1    1     1    1  0
 2       1        1    1   1      1     1    0    1     1    1  1
 3       1        1    1   1      1     1    1    0     1    1  1
 9       1        1    1   1      1     1    1    1     0    0  2
 2       1        1    1   1      1     0    1    1     1    0  2
 1       1        1    1   1      1     1    0    0     1    1  2
 2       1        1    1   1      1     0    1    1     0    0  3
 1       1        1    1   1      1     1    0    1     0    0  3
         0        0    0   0      0     4    4    4    12   14 38
```

表中1和0显示了缺失值模式，0表示变量的列中有缺失值，1则表示没有缺失值。第一行表述了“无缺失值”的模式（所有元素都为1）。第二行表述了“除了Span之外无缺失值”的模式。第一列表示各缺失值模式的实例个数，最后一列表示各模式中有缺失值的变量的个数。此处可以看到，有42个实例没有缺失值，仅2个实例缺失了Span。9个实例同时缺失了NonD和Dream的值，数据集包含了总共$(42 \times 0) + (2 \times 1) + \cdots + (1 \times 3) = 38$个缺失值。最后一行给出了每个变量中缺失值的数目。

15.3.2　图形探究缺失数据

虽然md.pattern()函数的表格输出非常简洁，但我通常觉得用图形展示模式更为清晰。VIM包提供了大量能可视化数据集中缺失值模式的函数，本节我们将学习其中几个：aggr()、matrixplot()和scattMiss()。

aggr()函数不仅绘制每个变量的缺失值数，还绘制每个变量组合的缺失值数。例如：

```
library("VIM")
aggr(sleep, prop=FALSE, numbers=TRUE)
```

上述代码的结果见图15-2。（VIM包将会打开GUI界面，你可以关闭它；本章我们使用代码完成所有的工作。）

可以看到，变量NonD有最大的缺失值数（14），有2个哺乳动物缺失了NonD、Dream和Sleep的评分。42个动物没有缺失值。

代码aggr(sleep, prop = TRUE, numbers = TRUE)将生成相同的图形，但用比例代替了计数。选项numbers = FALSE（默认）删去数值型标签。

matrixplot()函数可生成展示每个实例数据的图形。matrixplot(sleep)的图形见图15-3。此处，数值型数据被重新转换到[0, 1]区间，并用灰度来表示大小：浅色表示值小，深色表示值大。默认缺失值为红色。注意，在图15-3中，红色已经被手工阴影化处理，因此相对于灰色缺失值将非常显眼。你可以自己创建图形，让它与众不同。

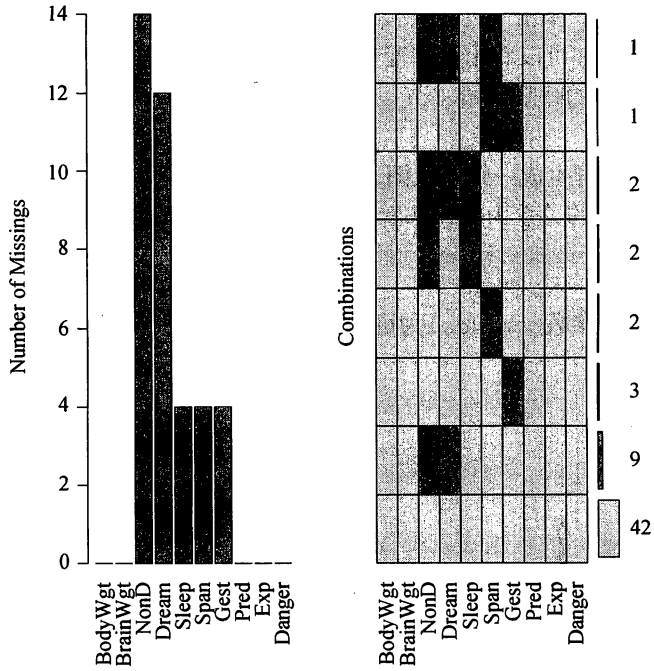


图15-2 aggr()生成的sleep数据集的缺失值模式图形（另见彩插图15-2）

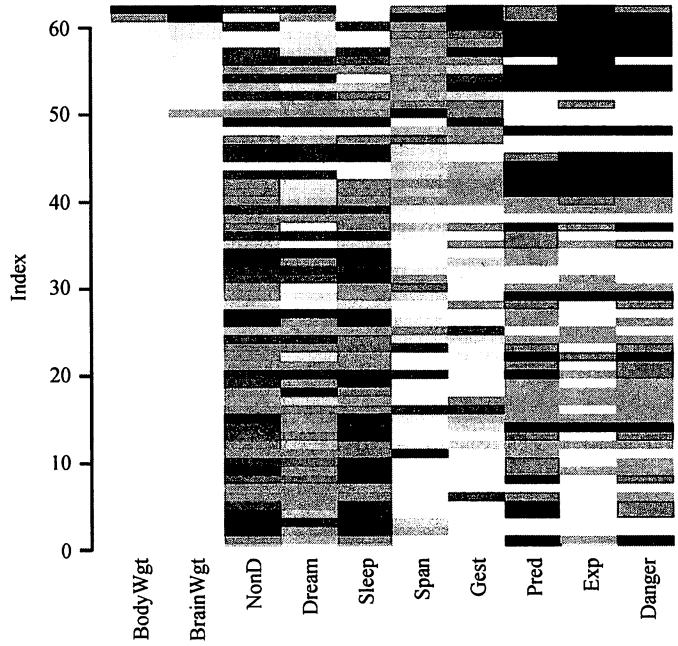


图15-3 sleep数据集按实例（行）展示真实值和缺失值的矩阵图。矩阵按BodyWgt重排（另见彩插图15-3）

该图形可以进行交互，单击一列将会按其对应的变量重排矩阵。图15-3中的行便按BodyWgt降序排列。通过矩阵图，你可以看出某些变量的缺失值模式是否与其他变量的真实值有关联。此图中可以看到，无缺失值的睡眠变量（Dream、NonD和Sleep）对应着较小的体重（BodyWgt）或脑重（BrainWgt）。

marginplot()函数可生成一幅散点图，在图形边界展示两个变量的缺失值信息。以做梦时长与哺乳动物妊娠期时长的关系为例，来看下列代码：

```
marginplot(sleep[c("Gest","Dream")], pch=c(20),
           col=c("darkgray", "red", "blue"))
```

它的生成图形见图15-4。参数pch和col为可选项，控制着绘图符号和使用的颜色。

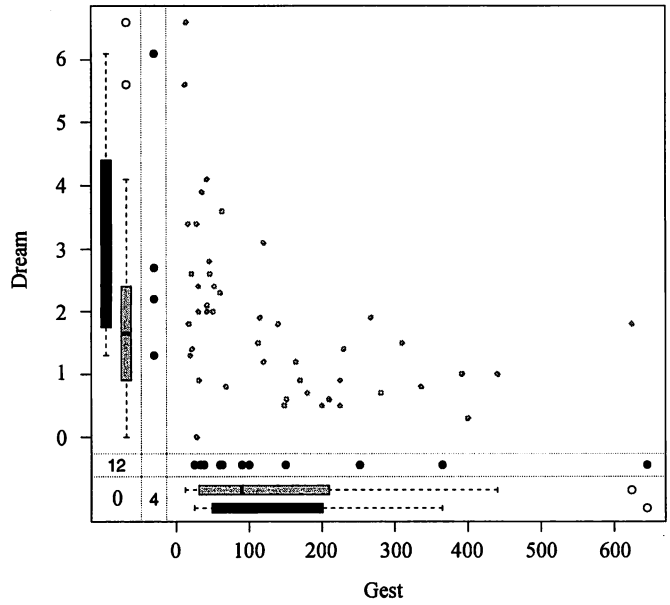


图15-4　做梦时长与妊娠期时长的散点图，边界展示了缺失数据的信息（另见彩插图15-4）

图形的主体是Gest和Dream（两变量数据都完整）的散点图。左边界的箱线图展示的是包含（深灰色）与不包含（红色）Gest值的Dream变量分布。注意，在灰度图上红色是更深的阴影。四个红色的点代表着缺失了Gest得分的Dream值。在底部边界上，Gest和Dream间的关系反过来了。可以看到，妊娠期和做梦时长呈负相关，缺失妊娠期数据时动物的做梦时长一般更长。两个变量均有缺失值的观测个数在两边界交叉处（左下角）用蓝色输出。

VIM包有许多图形可以帮助你理解缺失数据在数据集中的模式，包括用散点图、箱线图、直方图、散点图矩阵、平行坐标图、轴须图和气泡图来展示缺失值的信息，因此这个包很值得探索。

15.3.3　用相关性探索缺失值

在继续下文之前，还有些方法值得注意。你可用指示变量替代数据集中的数据（1表示缺失，

0表示存在），这样生成的矩阵有时称作*影子矩阵*。求这些指示变量间和它们与初始（可观测）变量间的相关性，有助于观察哪些变量常一起缺失，以及分析变量“缺失”与其他变量间的关系。

考虑如下代码：

```
x <- as.data.frame(abs(is.na(sleep)))
```

若sleep的元素缺失，则数据框x对应的元素为1，否则为0。你可以观察下数据的前几行：

```
> head(sleep, n=5)
   BodyWgt BrainWgt NonD Dream Sleep Span Gest Pred Exp Danger
1 6654.000   5712.0   NA    NA   3.3 38.6  645    3   5      3
2    1.000      6.6  6.3   2.0   8.3  4.5   42    3   1      3
3    3.385     44.5   NA    NA  12.5 14.0   60    1   1      1
4    0.920      5.7   NA    NA  16.5   NA   25    5   2      3
5 2547.000   4603.0  2.1   1.8   3.9 69.0  624    3   5      4

> head(x, n=5)
  BodyWgt BrainWgt NonD Dream Sleep Span Gest Pred Exp Danger
1       0        0    1     1     0    0    0    0   0      0
2       0        0    0     0     0    0    0    0   0      0
3       0        0    1     1     0    0    0    0   0      0
4       0        0    1     1     0    1    0    0   0      0
5       0        0    0     0     0    0    0    0   0      0
```

以下代码：

```
y <- x[which(sd(x) > 0)]
```

可提取含（但不全部是）缺失值的变量，而

```
cor(y)
```

可列出这些指示变量间的相关系数：

```
        NonD  Dream  Sleep   Span   Gest
NonD   1.000  0.907  0.486  0.015 -0.142
Dream  0.907  1.000  0.204  0.038 -0.129
Sleep  0.486  0.204  1.000 -0.069 -0.069
Span   0.015  0.038 -0.069  1.000  0.198
Gest  -0.142 -0.129 -0.069  0.198  1.000
```

此时，你可以看到Dream和NonD常常一起缺失（r = 0.91）。相对可能性较小的是Sleep和NonD一起缺失（r = 0.49），以及Sleep和Dream（r = 0.20）。

最后，你可以看到含缺失值变量与其他可观测变量间的关系：

```
> cor(sleep, y, use="pairwise.complete.obs")
           NonD  Dream   Sleep   Span   Gest
BodyWgt   0.227  0.223  0.0017 -0.058 -0.054
BrainWgt  0.179  0.163  0.0079 -0.079 -0.073
NonD         NA     NA      NA -0.043 -0.046
Dream    -0.189     NA -0.1890  0.117  0.228
Sleep    -0.080 -0.080      NA  0.096  0.040
Span      0.083  0.060  0.0052     NA -0.065
Gest      0.202  0.051  0.1597 -0.175     NA
Pred      0.048 -0.068  0.2025  0.023 -0.201
Exp       0.245  0.127  0.2608 -0.193 -0.193
```

```
Danger    0.065 -0.067  0.2089 -0.067 -0.204
Warning message:
In cor(sleep, y, use = "pairwise.complete.obs") :
  the standard deviation is zero
```

在这个相关系数矩阵中，行为可观测变量，列为表示缺失的指示变量。你可以忽略矩阵中的警告信息和NA值，这些都是方法中人为因素所导致的。

从相关系数矩阵的第一列可以看到，体重越大（r=0.227）、妊娠期越长（r=0.202）、睡眠暴露度越大（r=0.245）的动物无梦睡眠的评分更可能缺失。其他列的信息也可以按类似方式得出。注意，表中的相关系数并不特别大，表明数据是MCAR的可能性比较小，更可能为MAR。

不过也绝不能排除数据是NMAR的可能性，因为你并不知道缺失数据背后对应的真实数据是怎么样的。比如，你不可能知道哺乳动物做梦时长与该变量数据缺失概率间的关系。当缺乏强力的外部证据时，我们通常假设数据是MCAR或者MAR。

15.4　理解缺失数据的来由和影响

识别缺失数据的数目、分布和模式有两个目的：(1)分析生成缺失数据的潜在机制；(2)评价缺失数据对回答实质性问题的影响。具体来讲，我们想弄清楚以下几个问题。

- 缺失数据的比例多大？
- 缺失数据是否集中在少数几个变量上，抑或广泛存在？
- 缺失是随机产生的吗？
- 缺失数据间的相关性或与可观测数据间的相关性，是否可以表明产生缺失值的机制呢？

回答这些问题将有助于判断哪种统计方法最适合用来分析你的数据。例如，如果缺失数据集中在几个相对不太重要的变量上，那么你可以删除这些变量，然后再进行正常的数据分析。如果有一小部分数据（如小于10%）随机分布在整个数据集中（MCAR），那么你可以分析数据完整的实例，这样仍可以得到可靠且有效的结果。如果可以假定数据是MCAR或者MAR，那么你可以应用多重插补法来获得有效的结论。如果数据是NMAR，你则需要借助专门的方法，收集新数据，或者加入一个相对更容易、更有收益的行业。

以下是一些例子。

- 在最近一个关于找工作的问卷调查中，我发现一些项常常一同缺失。很明显这些项聚集在一起，因为调查对象没有意识到问卷的第三页的背面也包含了这些项目。此时，可以认为这些数据是MCAR。
- 在一个关于全球领导风格的调查中，学历变量经常性地缺失。调查显示欧洲的调查对象更可能在此项目上留白，这说明某些特定国家的调查对象没有理解变量的分类。此时，这种数据最可能是MAR。
- 最后，我还参与了一个抑郁症的研究。该研究发现，相对于年轻的病人，越老的病人越可能忽略描述抑郁状态的项。经过访谈发现，越年老的病人越不情愿承认他们的症状，因为如此做违反了他们“三缄其口”的价值观。但是，由于绝望和注意力无法集中，抑

郁症越严重的病人也越可能忽略这些项。此时，可以认为这种数据是NMAR。

正如你通过前述所了解的，模式的鉴别只是第一步。为了判断缺失值的来源，你需要理解研究的主题和数据收集过程。

假使已经知道了缺失数据的来源和影响，那么让我们看看如何转换标准的统计方法来适应缺失数据的分析。我们将重点学习三种非常流行的方法：恢复数据的推理方法、涉及删除缺失值的传统方法、涉及模拟的现代方法。沿着这个思路，我们将简要回顾一些在专业工作中应用的方法，以及已经废弃并需要扔掉的旧方法。而我们的目标一直未变：在没有完整信息的情况下，尽可能精确地回答收集数据所要解决的实质性问题。

15.5 理性处理不完整数据

推理方法会根据变量间的数学或者逻辑关系来填补或恢复缺失值。下面的一些例子有助于阐明这些方法。

在sleep数据集中，变量Sleep是Dream和NonD变量的和。若知道了它们中任意两个动物的得分，你便可以推导出第三个。因此，如果一些观测缺失了这三个变量中的一个，你便可以通过加减来恢复缺失值信息。

第二个例子，我们考察各代群体（依据出生年代区分，如沉默的一代、婴儿潮一代、婴儿潮后期一代、无名一代、千禧一代）在工作与生活间的平衡差异。调查对象都被问及了他们的出生日期和年龄，如果出生日期缺失，你便可以根据他们的年龄和其完成调查时的日期来填补他们的出生年份（以及他们所属的年代群体），这样便可使调查问卷完整。

另一个例子是通过逻辑关系来恢复缺失数据。数据来源于一系列的领导力研究，参与者被问及他们是否是经理（是/不是）和他们直接下属的个数（整数）。如果他们在是否是经理的问题上留白，但却告知他们有一个或多个直接下属，那么可以推断他们是经理。

最后一个例子是我经常参与的性别研究，比较的是男女领导风格和效力间的差异。参与者会完整填写他们的名字（姓和名）、性别和关于他们领导方式和影响的详细评价。如果参与者在性别问题上留白，为了将他们包含在研究中，我便需要插补这些缺失值。在最近一项对66 000个经理的研究中，11 000（17%）个人没有填写性别项。

在最后这个例子中，我会按以下推理过程进行处理。首先，将姓和性别交叉制表。一些姓会与男性相联系，一些会与女性相联系，还有一些会与两种性别相联系。比如，“William”出现了417次，总是男性；相反，“Chris”出现了237次，但有时是男性（86%，“克里斯”），有时是女性（14%，“克丽丝”）。如果一个姓在数据集中出现超过20次，并总是与男性或者女性（不是同时两者）相联系，我便认为该姓代表着一个性别。利用该假设，我创建了一个性别专有姓的性别查询表，查询这个表，我便能恢复7000个实例（有缺失值经理人中的63%）。

推理研究法常常需要创造性和想法，同时还需要许多数据处理技巧，而且数据的恢复可能是准确的（如睡眠的例子）或者近似的（性别的例子）。下一节我们将探究一种通过删除观测来创建完整数据集的方法。

15.6　完整实例分析（行删除）

在完整实例分析中，只有每个变量都包含了有效数据值的观测才会保留下来做进一步的分析。实际上，这样会导致包含一个或多个缺失值的任意一行都会被删除，因此常称作行删除法（listwise）、个案删除（case-wise）或剔除。大部分流行的统计软件包都默认采用行删除法来处理缺失值，因此许许多多的分析人员在使用诸如回归或者方差分析法来分析数据时，都没有意识到有“缺失值问题”需要处理！

函数complete.cases()可以用来存储没有缺失值的数据框或者矩阵形式的实例（行）：

```
newdata <- mydata[complete.cases(mydata),]
```

同样的结果可以用na.omit函数获得：

```
newdata <- na.omit(mydata)
```

两行代码表示的意思都是：mydata中所有包含缺失数据的行都被删除，然后结果才存储到newdata中。

现假设你对睡眠研究中变量间的关系很感兴趣。计算相关系数前，使用行删除法可删除所有含有缺失值的动物：

```
> options(digits=1)
> cor(na.omit(sleep))
         BodyWgt BrainWgt NonD Dream Sleep  Span  Gest  Pred  Exp Danger
BodyWgt     1.00     0.96 -0.4 -0.07  -0.3  0.47  0.71  0.10  0.4   0.26
BrainWgt    0.96     1.00 -0.4 -0.07  -0.3  0.63  0.73 -0.02  0.3   0.15
NonD       -0.39    -0.39  1.0  0.52   1.0 -0.37 -0.61 -0.35 -0.6  -0.53
Dream      -0.07    -0.07  0.5  1.00   0.7 -0.27 -0.41 -0.40 -0.5  -0.57
Sleep      -0.34    -0.34  1.0  0.72   1.0 -0.38 -0.61 -0.40 -0.6  -0.60
Span        0.47     0.63 -0.4 -0.27  -0.4  1.00  0.65 -0.17  0.3   0.01
Gest        0.71     0.73 -0.6 -0.41  -0.6  0.65  1.00  0.09  0.6   0.31
Pred        0.10    -0.02 -0.4 -0.40  -0.4 -0.17  0.09  1.00  0.6   0.93
Exp         0.41     0.32 -0.6 -0.50  -0.6  0.32  0.57  0.63  1.0   0.79
Danger      0.26     0.15 -0.5 -0.57  -0.6  0.01  0.31  0.93  0.8   1.00
```

表中的相关系数仅通过所有变量均为完整数据的42个动物计算得来。（注意代码cor(sleep, use="complete.obs")可生成同样的结果。）

若想研究寿命和妊娠期对睡眠中做梦时长的影响，可应用行删除法的线性回归：

```
> fit <- lm(Dream ~ Span + Gest, data=na.omit(sleep))
> summary(fit)
Call:
lm(formula = Dream ~ Span + Gest, data = na.omit(sleep))

Residuals:
   Min     1Q Median     3Q    Max
-2.333 -0.915 -0.221  0.382  4.183

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  2.480122   0.298476    8.31  3.7e-10 ***
```

```
Span        -0.000472   0.013130   -0.04    0.971
Gest        -0.004394   0.002081   -2.11    0.041 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 1 on 39 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.167,      Adjusted R-squared: 0.125
F-statistic: 3.92 on 2 and 39 DF,  p-value: 0.0282
```

此处可以看到，动物妊娠期越短，做梦时长越长（控制寿命不变）；而控制妊娠期不变时，寿命与做梦时长不相关。整个分析基于有完整数据的42个实例。

在之前的例子中，如果data=na.omit(sleep)被data = sleep替换，将会出现什么情况呢？和许多R函数一样，lm()将使用有限的行删除法定义。只有用函数拟合的、含缺失值的变量（本例是Dream、Span和Gest）对应的实例才会被删除，这时数据分析将基于44个实例。

行删除法假定数据是MCAR（即完整的观测只是全数据集的一个随机子样本）。此例中，我们假定42个动物是62个动物的一个随机子样本。如果违反了MCAR假设，回归参数的结果将是有偏的。由于删除了所有含缺失值的观测，减少了可用的样本，这也将导致统计效力的降低。此例中，行删除法减少了32%的样本量。接下来，我们将考虑一种能够利用整个数据集的方法（可以囊括那些含缺失值的观测）。

15.7 多重插补

多重插补（MI）是一种基于重复模拟的处理缺失值的方法。在面对复杂的缺失值问题时，MI是最常选用的方法，它将从一个包含缺失值的数据集中生成一组完整的数据集（通常是3到10个）。每个模拟数据集中，缺失数据将用蒙特卡洛方法来填补。此时，标准的统计方法便可应用到每个模拟的数据集上，通过组合输出结果给出估计的结果，以及引入缺失值时的置信区间。R中可利用Amelia、mice和mi包来执行这些操作。本节中，我们将重点学习mice包（利用链式方程的多元插补）提供的方法。

图15-5可以帮助理解mice包的操作过程。

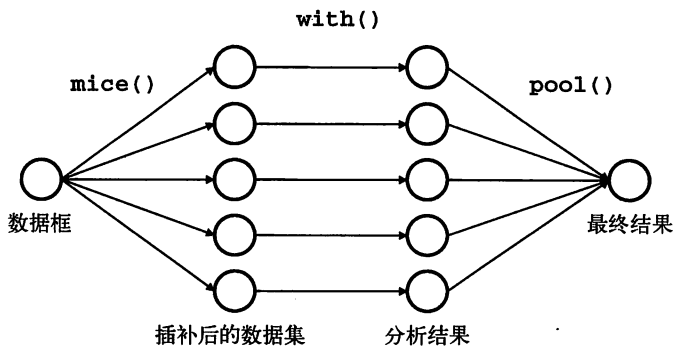


图15-5 通过mice包应用多重插补的步骤

函数mice()首先从一个包含缺失数据的数据框开始，然后返回一个包含多个（默认为5个）完整数据集的对象。每个完整数据集都是通过对原始数据框中的缺失数据进行插补而生成的。由于插补有随机的成分，因此每个完整数据集都略有不同。然后，with()函数可依次对每个完整数据集应用统计模型（如线性模型或广义线性模型），最后，pool()函数将这些单独的分析结果整合为一组结果。最终模型的标准误和p值都将准确地反映出由于缺失值和多重插补而产生的不确定性。

mice()函数如何插补缺失值？

缺失值的插补通过Gibbs抽样完成。每个包含缺失值的变量都默认可通过数据集中的其他变量预测得来，于是这些预测方程便可用来预测缺失数据的有效值。该过程不断迭代直到所有的缺失值都收敛为止。对于每个变量，用户可以选择预测模型的形式（称为基本插补法）和待选入的变量。

默认地，预测的均值用来替换连续型变量中的缺失数据，而Logistic或多元Logistic回归则分别用来替换二值目标变量（两水平因子）或多值变量（多于两水平的因子）。其他基本插补法包括贝叶斯线性回归、判别分析、两水平正态插补和从观测值中随机抽样。用户也可以选择自己独有的方法。

基于mice包的分析通常符合以下分析过程：

```
library(mice)
imp <- mice(mydata, m)
fit <- with(imp, analysis)
pooled <- pool(fit)
summary(pooled)
```

- mydata是一个包含缺失值的矩阵或数据框。
- imp是一个包含*m*个插补数据集的列表对象，同时还含有完成插补过程的信息。默认地，*m*为5。
- *analysis*是一个表达式对象，用来设定应用于*m*个插补数据集的统计分析方法。方法包括做线性回归模型的lm()函数、做广义线性模型的glm()函数、做广义可加模型的gam()，以及做负二项模型的nbrm()函数。表达式在函数的括号中，~的左边是响应变量，右边是预测变量（用+符号分隔开）。
- fit是一个包含*m*个单独统计分析结果的列表对象。
- pooled是一个包含这*m*个统计分析平均结果的列表对象。

现将多重插补法应用到sleep数据集上。重复15.6节的分析过程，不过此处我们将利用所有的62个动物。设定随机种子为1234，这样你的结果将和我的分析结果一样：

```
> library(mice)
> data(sleep, package="VIM")
> imp <- mice(sleep, seed=1234)

 [...output deleted to save space...]
```

```
> fit <- with(imp, lm(Dream ~ Span + Gest))
> pooled <- pool(fit)
> summary(pooled)
                 est      se      t   df Pr(>|t|)    lo 95
(Intercept)  2.58858 0.27552  9.395 52.1 8.34e-13  2.03576
Span        -0.00276 0.01295 -0.213 52.9 8.32e-01 -0.02874
Gest        -0.00421 0.00157 -2.671 55.6 9.91e-03 -0.00736
               hi 95 nmis    fmi
(Intercept)  3.14141   NA 0.0870
Span         0.02322    4 0.0806
Gest        -0.00105    4 0.0537
```

此处，你可以看到Span的回归系数不显著（$p \approx 0.08$），Gest的系数在$p < 0.01$的水平下很显著。若将这些结果与利用完整数据分析法（15.6节）所得的结果对比，你会发现背离的结论相同。当控制寿命不变时，妊娠期与做梦时长有一个（统计）显著的、负相关的关系。完整数据分析法基于42个有完整数据的动物，而此处的分析法基于整个数据集中全部62个动物的数据。另外，fmi栏也展示了缺失信息（即由于引入了缺失数据而引起的变异所占整体不确定性的比例）。

你可以通过检查分析过程所创建的对象来获取更多的插补信息。例如，来看imp对象的汇总信息：

```
> imp

Multiply imputed data set
Call:
mice(data = sleep, seed = 1234)
Number of multiple imputations:  5
Missing cells per column:
 BodyWgt BrainWgt     NonD    Dream    Sleep     Span     Gest     Pred
       0        0       14       12        4        4        4        0
     Exp   Danger
       0        0
Imputation methods:
 BodyWgt BrainWgt     NonD    Dream    Sleep     Span     Gest     Pred
      ""       ""    "pmm"    "pmm"    "pmm"    "pmm"    "pmm"       ""
     Exp   Danger
      ""       ""
VisitSequence:
 NonD Dream Sleep  Span  Gest
    3     4     5     6     7
PredictorMatrix:
         BodyWgt BrainWgt NonD Dream Sleep Span Gest Pred Exp Danger
BodyWgt        0        0    0     0     0    0    0    0   0      0
BrainWgt       0        0    0     0     0    0    0    0   0      0
NonD           1        1    0     1     1    1    1    1   1      1
Dream          1        1    1     0     1    1    1    1   1      1
Sleep          1        1    1     1     0    1    1    1   1      1
Span           1        1    1     1     1    0    1    1   1      1
Gest           1        1    1     1     1    1    0    1   1      1
Pred           0        0    0     0     0    0    0    0   0      0
Exp            0        0    0     0     0    0    0    0   0      0
Danger         0        0    0     0     0    0    0    0   0      0
Random generator seed value:  1234
```

从输出结果可以看到，五个数据集同时被创建，预测均值（pmm）匹配法被用来处理每个含缺失数据的变量。BodyWgt、BrainWgt、Pred、Exp和Danger没有进行插补（" "），因为它们并没有缺失数据。VisitSequence从左至右展示了插补的变量，从NonD开始，以Gest结束。最后，预测变量矩阵（PredictorMatrix）展示了进行插补过程的含有缺失数据的变量，它们利用了数据集中其他变量的信息。（在矩阵中，行代表插补变量，列代表为插补提供信息的变量，1和0分别表示使用和未使用。）

通过提取imp对象的子成分，可以观测到实际的插补值。如：

```
> imp$imp$Dream
     1   2   3   4   5
1  0.5 0.5 0.5 0.5 0.0
3  2.3 2.4 1.9 1.5 2.4
4  1.2 1.3 5.6 2.3 1.3
14 0.6 1.0 0.0 0.3 0.5
24 1.2 1.0 5.6 1.0 6.6
26 1.9 6.6 0.9 2.2 2.0
30 1.0 1.2 2.6 2.3 1.4
31 5.6 0.5 1.2 0.5 1.4
47 0.7 0.6 1.4 1.8 3.6
53 0.7 0.5 0.7 0.5 0.5
55 0.5 2.4 0.7 2.6 2.6
62 1.9 1.4 3.6 5.6 6.6
```

展示了在Dream变量上有缺失值的12个动物的5次插补值。检查该矩阵可以帮助你判断插补值是否合理。若睡眠时长出现了负值，插补将会停止（否则结果将会很糟糕）。

利用complete()函数可以观察*m*个插补数据集中的任意一个。格式为：

```
complete(imp, action=#)
```

其中#指定*m*个完整数据集中的一个来展示，比如：

```
> dataset3 <- complete(imp, action=3)
> dataset3
  BodyWgt BrainWgt NonD Dream Sleep Span Gest Pred Exp Danger
1 6654.00   5712.0  2.1   0.5   3.3 38.6  645    3   5      3
2    1.00      6.6  6.3   2.0   8.3  4.5   42    3   1      3
3    3.38     44.5 10.6   1.9  12.5 14.0   60    1   1      1
4    0.92      5.7 11.0   5.6  16.5  4.7   25    5   2      3
5 2547.00   4603.0  2.1   1.8   3.9 69.0  624    3   5      4
6   10.55    179.5  9.1   0.7   9.8 27.0  180    4   4      4
[…output deleted to save space…]
```

展示了多重插补过程中创建的第三个完整数据集。

由于篇幅限制，此处我们只是简略介绍了mice包提供的多重插补法（MI）。mi和Amelia包也提供了一些有用的方法。如果你对缺失值的多重插补法感兴趣，可以参考以下学习资源：

- 多重插补FAQ页面（www.stat.psu.edu/~jls/mifaq.html）；
- Van Buuren和Croothuis-Oudshoorn的论文（2010）以及Yu-Sung、Gelman、Hill和Yajima（2010）的论文；
- “Amelia II: A Program for Missing Data”（http://gking.harvard.edu/amelia/）。

上述每个资源都能加深你对这些虽然未充分利用但却十分重要的方法的理解。

15.8 处理缺失值的其他方法

R还支持其他一些处理缺失值的方法。虽然它们不如之前的方法应用广泛，但表15-2列出的包在一些专业领域非常有用。

表15-2 处理缺失数据的专业方法

软 件 包	描 述
Hmisc	包含多种函数，支持简单插补、多重插补和典型变量插补
mvnmle	对多元正态分布数据中缺失值的最大似然估计
cat	对数线性模型中多元类别型变量的多重插补
arrayImpute、arrayMissPattern、SeqKnn	处理微阵列缺失数据的实用函数
longitudinalData	相关的函数列表，比如对时间序列缺失值进行插补的一系列函数
kmi	处理生存分析缺失值的Kaplan-Meier多重插补
mix	一般位置模型中混合类别型和连续型数据的多重插补
pan	多元面板数据或聚类数据的多重插补

最后，还有两种仍在使用中的缺失值处理方法，但它们已经过时，都应被舍弃，分别是成对删除（pairwise deletion）和简单插补（simple imputation）。

15.8.1 成对删除

处理含缺失值的数据集时，成对删除常作为行删除的备选方法使用。对于成对删除，观测只是当它含缺失数据的变量涉及某个特定分析时才会被删除。考虑如下代码：

```
> cor(sleep, use="pairwise.complete.obs")
         BodyWgt BrainWgt NonD Dream Sleep  Span Gest  Pred  Exp Danger
BodyWgt     1.00     0.93 -0.4  -0.1  -0.3  0.30  0.7  0.06  0.3   0.13
BrainWgt    0.93     1.00 -0.4  -0.1  -0.4  0.51  0.7  0.03  0.4   0.15
NonD       -0.38    -0.37  1.0   0.5   1.0 -0.38 -0.6 -0.32 -0.5  -0.48
Dream      -0.11    -0.11  0.5   1.0   0.7 -0.30 -0.5 -0.45 -0.5  -0.58
Sleep      -0.31    -0.36  1.0   0.7   1.0 -0.41 -0.6 -0.40 -0.6  -0.59
Span        0.30     0.51 -0.4  -0.3  -0.4  1.00  0.6 -0.10  0.4   0.06
Gest        0.65     0.75 -0.6  -0.5  -0.6  0.61  1.0  0.20  0.6   0.38
Pred        0.06     0.03 -0.3  -0.4  -0.4 -0.10  0.2  1.00  0.6   0.92
Exp         0.34     0.37 -0.5  -0.5  -0.6  0.36  0.6  0.62  1.0   0.79
Danger      0.13     0.15 -0.5  -0.6  -0.6  0.06  0.4  0.92  0.8   1.00
```

此例中，任何两个变量的相关系数都只利用了仅这两变量的可用观测（忽略其他变量）。比如BodyWgt和BrainWgt基于62个（所有变量下的动物数）动物的数据，而BodyWgt和NonD基于42个动物的数据，Dream和NonDream则基于46个动物的数据。

虽然成对删除似乎利用了所有可用数据，但实际上每次计算都只用了不同的数据子集。这将

会导致一些扭曲的、难以解释的结果，所以我建议不要使用该方法。

15.8.2　简单（非随机）插补

所谓简单插补，即用某个值（如均值、中位数或众数）来替换变量中的缺失值。若使用均值替换，Dream变量中的缺失值可用1.97来替换，NonD中的缺失值可用8.67来替换（两个值分别是Dream和NonD的均值）。注意这些替换是非随机的，这意味着不会引入随机误差（与多重插补不同）。

简单插补的一个优点是，解决“缺失值问题”时不会减少分析过程中可用的样本量。虽然简单插补用法很简单，但是对于非MCAR的数据会产生有偏的结果。若缺失数据的数目非常大，那么简单插补很可能会低估标准差、曲解变量间的相关性，并会生成不正确的统计检验的p值。与成对删除一样，我建议在解决缺失数据的问题时尽量避免使用该方法。

15.9　小结

多数统计方法都假设输入数据是完整的且不包含缺失值（如NA、NaN、Inf）。但是现实世界中的大多数数据集都包含了缺失值。因此，在进行下一步分析之前，你要么删除缺失值，要么用合理的替换值代替它们。统计软件包常常会提供一些默认的缺失值处理方法，但是这些方法可能不是最优的。因此，理解各种各样可用的方法以及它们的分支就显得非常重要。

在本章中，我们学习了一些鉴别缺失值和探究缺失值模式的方法。我们的目标是理解产生缺失值的机制，以及它们对后续分析可能产生的影响。我们回顾了三种流行的缺失值处理方法：推理法、行删除法、多重插补。

当数据存在冗余信息或有外部信息可用时，推理法可用来恢复缺失值。当数据是MCAR，后续样本量的减少对统计检验效力不会造成很严重的影响时，行删除法非常有用。而当你认为数据是MCAR或MAR，并且缺失数据问题非常复杂时，多重插补将是一个非常实用的方法。虽然许多数据分析师对多重插补法不熟悉，但是用户贡献的软件包（mice、mi和Amelia）使得该方法应用起来非常容易。我相信在不久的将来，多重插补法将会得到广泛的应用。

本章最后简略介绍了R中处理某些专业领域中缺失值的软件包，并单独列出了一些在处理缺失值时应该尽量避免使用的方法（成对删除和简单插补）。

下一章，我们将探究高级作图方法，包括lattice图形的使用、ggplot2系统，以及交互式图形方法。

第16章 高级图形进阶

本章内容

- Trellis图形和lattice包
- ggplot2的图形语法
- 交互式图形

在之前的几章中，我们学习了各种各样普通的和特殊的图形（绘图过程中你会发现许多乐趣），它们大部分都是利用R的基础绘图系统创建的。众所周知，R中各种方法百花齐放，所以了解到有四种独立而完整的图形系统这一事实，你也不必感到惊奇。

除了基础图形，grid、lattice和ggplot2软件包也提供了图形系统，它们克服了R基础图形系统的低效性，大大扩展了R的绘图能力。

grid图形系统可以很容易控制图形基础单元，给予编程者创作图形极大的灵活性。lattice包通过一维、二维或三维条件绘图，即所谓的栅栏（trellis）图形来对多元变量关系进行直观展示。ggplot2包则基于一种全面的图形“语法”，提供了一种全新的图形创建方法。

本章我们将首先回顾这四种图形系统，然后重点介绍lattice和ggplot2包生成的图形。这两个包极大地扩展了R绘图的范畴，提高了图形的质量。

本章最后还会介绍交互式图形，因为与图形实时交互可以使你加深对数据的理解，很快洞察到变量间的关系。届时，我们将重点介绍iplots、playwith、latticist和rggobi包提供的功能。

16.1 R中的四种图形系统

如前所述，R中有四种主要的图形系统。其中基础图形系统由Ross Ihaka编写，每个R都默认安装，之前几章中的大部分图形都是依赖于基础图形函数创建的。

grid图形系统由Paul Murrell（2006）编写，可通过grid包安装执行。grid图形提供了一种比标准图形系统更低水平的方法。用户可以在图形设备上随意创建矩形区域，在该区域定义坐标系统，然后使用一系列丰富的绘图基础单元来控制图形元素的摆放和外观。

grid图形的灵活性对于软件开发者是非常有价值的，但是grid包没有提供生成统计图形以及

完整绘图的函数。因此，数据分析师很少直接采用grid包来分析数据。

lattice包由Deepayan Sarkar（2008）编写，可绘制Cleveland（1985，1993）所描述的栅栏图形，具体描述可参见Trellis网站（http://netlib.bell-labs.com/cm/ms/departments/sia/project/trellis/）。基于grid包，lattice包对多元数据的可视化功能已经远超Cleveland的原始方法，它为R提供了一种全面的、创建统计图形的备选系统。

ggplot2包由Hadley Wickham（2009a）编写，它提供了一种基于Wilkinson（2005）所描述的图形语法的图形系统，Wickham（2009b）还对该语法进行了扩展。ggplot2包的目标是提供一个全面的、基于语法的、连贯一致的图形生成系统，允许用户创建新颖的、有创新性的数据可视化图形。

四种系统的载入方式有所不同，见表16-1。基础图形函数可自动调用，而grid和lattice函数的调用必须要加载相应的包（如library(lattice)）。要调用ggplot2函数需下载并安装该包（install.packages("ggplot2")），第一次使用前还要进行加载（library(ggplot2)）。

表16-1　图形系统的载入

系　统	基础安装中是否包含	是否需要显式加载
base	是	否
grid	是	是
lattice	是	是
ggplot2	否	是

由于我们主要关注实际的数据分析，所以本章并不会详细介绍grid包。（如果你感兴趣，可参考Murrell博士的Grid网站www.stat.auckland.ac.nz/~paul/grid/grid.html，上面有该包的详细说明。）我们将探究的是lattice和ggplot2包，它们都可让你轻松创建出一些（用其他方法可能不太方便创建的）独特而实用的图形。

16.2　lattice 包

lattice包为单变量和多变量数据的可视化提供了一个全面的图形系统。由于它可以轻松生成栅栏图形，因此许多用户都会使用它。

在一个或多个其他变量的条件下，栅栏图形展示某个变量的分布或与其他变量间的关系。考虑如下问题：*纽约合唱团中歌手的身高随着他们所属的声部如何变化？*

lattice包中的singer数据集包含了合唱成员的身高和声部数据。来看下列代码：

```
library(lattice)
histogram(~height | voice.part, data = singer,
    main="Distribution of Heights by Voice Pitch",
    xlab="Height (inches)")
```

height是因变量，voice.part被称作条件变量（conditioning variable），这段代码对八个声部的每一个都创建一个直方图，见图16-1。图形显示男高音和男低音比女低音和女高音身高要高。

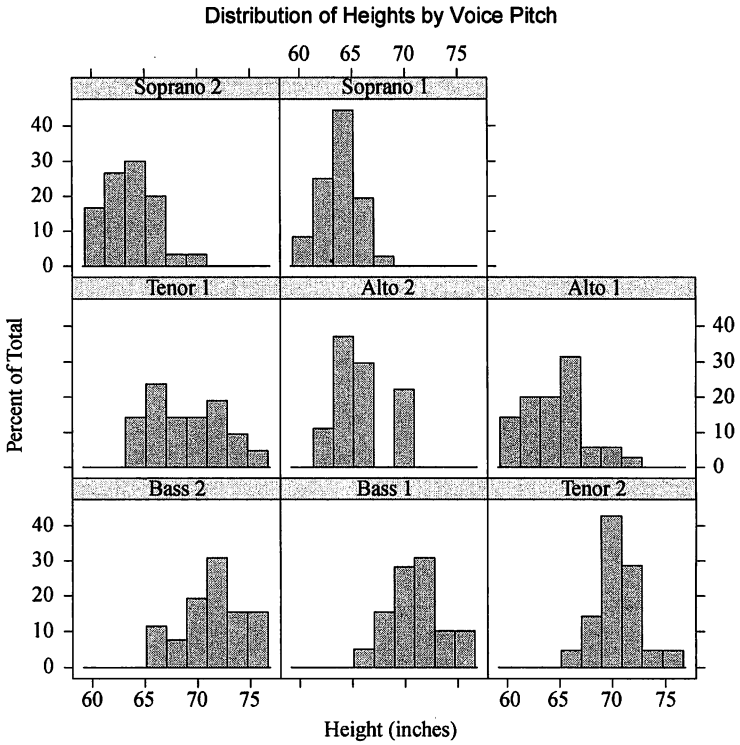


图16-1 以声部为条件的歌手身高栅栏图

在栅栏图形中，单个面板要依据条件变量的各个水平来创建。如果指定了多个条件变量，那么一个面板将按照各个因子水平的组合来创建。然后面板将被排成一个阵列以进行比较。每个面板在一个区域都会有一个标签，这里的区域称作条带区域（strip）。随后你将看到，用户可对每个面板中展示的图形、条带的格式和位置、面板的摆放、图例的内容和位置以及其他许多图形特征进行控制。

`lattice`包提供了丰富的函数，可生成单变量图形（点图、核密度图、直方图、柱状图和箱线图）、双变量图形（散点图、带状图和平行箱线图）和多变量图形（三维图和散点图矩阵）。

各种高级绘图函数都服从以下格式：

```
graph_function(formula, data=, options)
```

- *`graph_function`*是表16-2的第二栏列出的某个函数。
- *`formula`*指定要展示的变量和条件变量。
- `data`指定一个数据框。
- *`options`*是逗号分隔参数，用来修改图形的内容、摆放方式和标注。表16-3列出了一些常见的选项。

表16-2　lattice包中的图形类型和相应函数

图形类型	函　数	表达式示例
三维等高线图	contourplot()	z ~ x*y
三维水平图	levelplot()	z ~ y*x
三维散点图	cloud()	z ~x*y|A
三维线框图	wireframe()	z~y*x
条形图	barchart()	x ~ A或A ~ x
箱线图	bwplot()	x ~ A或A ~ x
点图	dotplot()	~ x|A
直方图	histogram()	~ x
核密度图	densityplot()	~ x|A*B
平行坐标图	parallel()	dataframe
散点图	xyplot()	y ~ x|A
散点图矩阵	splom()	dataframe
带状图	stripplot()	A ~ x或x ~ A

*注意，在这些表达式中，小写字母代表数值型变量，大写字母代表类别型变量。

表16-3　lattice中高级绘图函数的常见选项

选　项	描　述
aspect	数值，设定每个面板中图形的宽高比
col、pch、lty、lwd	向量，分别设定图形中的颜色、符号、线条类型和线宽
Groups	用来分组的变量（因子）
index.cond	列表，设定面板的展示顺序
key(或auto.key)	函数，添加分组变量的图例符号
layout	两元素数值型向量，设定面板的摆放方式（行数和列数）；如有需要，可以添加第三个元素，以指定页数
Main、sub	字符型向量，设定主标题和副标题
Panel	函数，设定每个面板要生成的图形
Scales	列表，添加坐标轴标注信息
Strip	函数，设定面板条带区域
Split、position	数值型向量，在一页上绘制多幅图形
Type	字符型向量，设定一个或多个散点图的绘图参数（如p=点、l=线、r=回归、smooth=平滑曲线、g=格点）
Xlab、ylab	字符型向量，设定横轴和纵轴标签
Xlim、ylim	两元素数值型向量，分别设定横轴和纵轴的最小和最大值

设小写字母代表数值型变量，大写字母代表类别型变量（因子）。在高级绘图函数中，表达

式形式通常为：

```
y ~ x | A * B
```

在竖线左边的变量称为主要（primary）变量，右边的变量称为条件（conditioning）变量。主要变量将变量映射到每个面板的坐标轴上，此处，y ~ x表示变量分别映射到纵轴和横轴上。对于单变量绘图，用~ x代替y ~ x即可；对于三维图形，用z ~ x*y代替y ~ x，而对于多变量绘图（散点图矩阵或平行坐标图）用一个数据框代替y ~ x即可。注意，条件变量总是可以自行挑选的。

根据上述的逻辑，~ x | A即展示因子A各个水平下数值型变量x的分布情况；y ~ x | A*B即展示因子A和B各个水平组合下数值型变量x和y间的关系。而A ~ x则表示类别型变量A在纵轴上，数值型变量x在横轴上进行展示。~ x表示仅展示数值型变量x，更多例子可参考表16-2。

若想迅速浏览下lattice图形，可尝试运行代码清单16-1中的代码。图形是根据数据框mtcar中的小汽车数据（里程数、车重、挡位数、气缸数等）绘制而成。你也可以变换表达式，观察下结果有何不同。（为节省空间，此处略去了输出结果。）

代码清单16-1 lattice绘图示例

```
library(lattice)
attach(mtcars)

gear <- factor(gear, levels=c(3, 4, 5),                    ← 赋予因子新的值标签
               labels=c("3 gears", "4 gears", "5 gears"))
cyl <- factor(cyl, levels=c(4, 6, 8),
              labels=c("4 cylinders", "6 cylinders", "8 cylinders"))

densityplot(~mpg,
            main="Density Plot",
           xlab="Miles per Gallon")

densityplot(~mpg | cyl,
            main="Density Plot by Number of Cylinders",
            xlab="Miles per Gallon")

bwplot(cyl ~ mpg | gear,
       main="Box Plots by Cylinders and Gears",
       xlab="Miles per Gallon", ylab="Cylinders")

xyplot(mpg ~ wt | cyl * gear,
       main="Scatter Plots by Cylinders and Gears",
       xlab="Car Weight", ylab="Miles per Gallon")

cloud(mpg ~ wt * qsec | cyl,
      main="3D Scatter Plots by Cylinders")

dotplot(cyl ~ mpg | gear,
        main="Dot Plots by Number of Gears and Cylinders",
        xlab="Miles Per Gallon")
```

```
splom(mtcars[c(1, 3, 4, 5, 6)],
      main="Scatter Plot Matrix for mtcars Data")

detach(mtcars)
```

我们可以存储和操作lattice包中的高级绘图函数生成的图形。来看下列代码：

```
library(lattice)
mygraph <- densityplot(~height|voice.part, data=singer)
```

它创建了一个栅栏密度图，并存储在mygraph对象中。但是此时不会展示任何图形，只有调用plot(mygraph)（或mygraph）时才会展示图形。

通过选项（options），你可以很轻松地修改lattice图形。表16-3列出了一些常见的选项，在本章后面你可以看到它们的许多应用示例。

在16.2.2节，你可以看到这些选项在高级函数或面板函数中的应用和讨论。

另外，你还可以使用update()函数来修改lattice图形对象。继续singer示例，来看下列代码：

```
update(mygraph, col="red", pch=16, cex=.8, jitter=.05, lwd=2)
```

将使用红色曲线和红色符号（color = "red"）、填充的点（pch = 16）、更小（cex = .8）和更多高度扰动的点（jitter = .05），以及加粗的曲线（lwd = 2）来重新绘制图形。了解了高级lattice函数的一般结构后，下面我们来详细讨论条件变量。

16.2.1　条件变量

正如以上你所看到的，lattice图形的一个最强大之处便是可以添加条件变量。若添加一个条件变量，每个水平下都会创建一个面板。若添加两个条件变量，则会根据两个变量各个水平的组合分别创建面板。通常，没有必要添加两个以上的条件变量。

通常，条件变量是因子。但是，如果想以连续型变量为条件，该怎么办呢？一种方法是利用R的cut()函数将连续型变量转换为离散变量。另外，lattice包提供了一些将连续型变量转化为瓦块（shingle）数据结构的函数。特别地，连续型变量会被分割到一系列（可能）重叠的数值范围中。如函数：

```
myshingle <- equal.count(x, number=#, overlap=proportion)
```

将会把连续型变量x分割到#区间中，重叠度为proportion，每个数值范围内的观测数相等，并返回为一个变量myshingle（或类shingle）。输出或者绘制该对象（如plot(myshingle)）将会展示瓦块区间。

一旦一个连续型变量被转换为一个瓦块，你便可以将它作为一个条件变量使用。例如，用mtcars数据集来探究以发动机排量为条件时，每加仑英里数和车重的关系。由于发动机排量是一个连续型变量，首先需要将其转为一个三水平的瓦块变量：

```
displacement <- equal.count(mtcars$disp, number=3, overlap=0)
```

然后，在xyplot()函数中使用该变量：

```
xyplot(mpg~wt|displacement, data=mtcars,
   main = "Miles per Gallon vs. Weight by Engine Displacement",
   xlab = "Weight", ylab = "Miles per Gallon",
   layout=c(3, 1), aspect=1.5)
```

结果见图16-2。注意，此处我们使用了选项来修改面板的布局（三列和一行）和宽高比，这样更方便对三组进行比较。

比较图16-1和图16-2，你会发现面板的条带区域的标签有所不同。图16-2展示了条件变量的连续特性，深色表示每个面板中条件变量的取值范围。下节中，我们将使用面板函数进一步自定义输出结果。

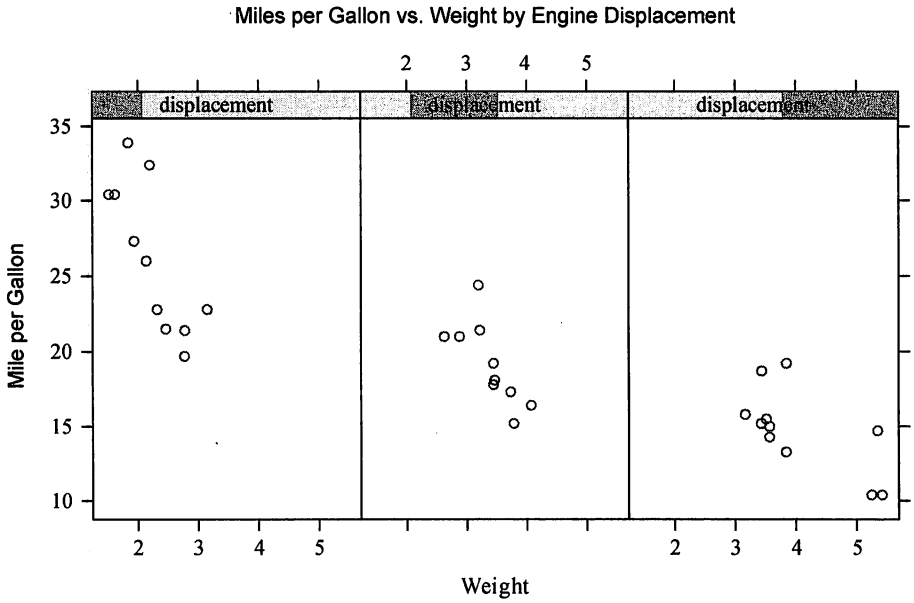


图16-2 以发动机排量为条件时加仑英里数与车重的栅栏图。由于发动机排量是一个连续型变量，因此将其转化为三个非重叠的、内部观测数相等的瓦块

16.2.2 面板函数

表16-2中的每个高级绘图函数都调用了一个默认的函数来绘制面板。这些默认的函数服从如下命名惯例：`panel.`*`graph_function`*，其中*`graph_function`*是该水平绘图函数。如：

```
xyplot(mpg~wt|displacement, data=mtcars)
```

也可以写成：

```
xyplot(mpg~wt|displacement, data=mtcars, panel=panel.xyplot)
```

这是一个非常强大的功能，因为它使你可以使用自定义函数替换默认的面板函数。你也可以将`lattice`包中的50多个默认面板函数中的某个或多个整合到自定义的函数中。自定义的面板函数具有极大的灵活性，你可以随意设计输出结果以满足要求。下面让我们来看一些示例。

之前的章节中，我们绘制了以发动机排量为条件时汽油英里数与车重的散点图。若想添加回归线、轴须线和网格线该怎么办呢？此时你便可以创建自己的面板函数（见代码清单16-2），图形结果见图16-3。

代码清单16-2　自定义面板函数的xyplot

```
displacement <- equal.count(mtcars$disp, number=3, overlap=0)

mypanel <- function(x, y) {
             panel.xyplot(x, y, pch=19)
             panel.rug(x, y)
             panel.grid(h=-1, v=-1)
             panel.lmline(x, y, col="red", lwd=1, lty=2)
           }

xyplot(mpg~wt|displacement, data=mtcars,
       layout=c(3, 1),
       aspect=1.5,
       main = "Miles per Gallon vs. Weight by Engine Displacement",
       xlab = "Weight",
       ylab = "Miles per Gallon",
       panel = mypanel)
```

❶ 自定义面板函数

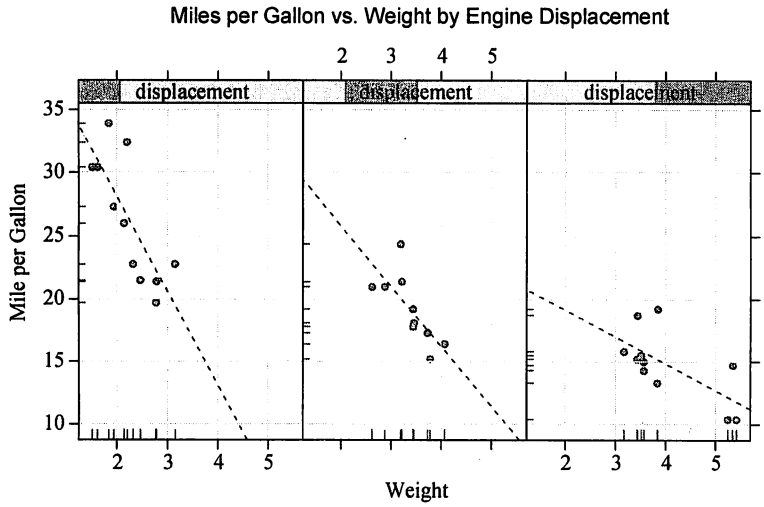


图16-3　以发动机排量为条件时每加仑英里数与车重的栅栏图。此处使用自定义的面板函数添加了回归线、轴须线和网格线

此处，我们将四个独立的绘制函数整合到自己的mypanel()函数中，然后通过xyplot()函数中的panel =选项将其展示出来❶。panel.xyplot()函数生成了填充圆圈（pch = 19）的散点图。panel.rug()函数在每个面板的x轴和y轴上添加了轴须线。panel.rug(x, FALSE)或panel.rug(FALSE, y)将分别只对横轴或纵轴添加轴须。panel.grid()函数添加了水平和竖直的网格线（使用负数强制它们与轴标签对齐）。最后，panel.lmline()函数添加了一条红色的（col="red"）、标准粗细（lwd = 1）的虚线（lty = 2）回归线。每个默认的面板函数

都有自己的结构和选项，更多细节可查看它们的帮助页（如help(panel.abline)）。

第二个例子，我们将绘制以汽车传动类型为条件时每加仑英里数与发动机排量（连续型变量）的关系图。除了创建单独的自排和手排发动机的面板，我们还将添加平滑拟合曲线和水平均值线。代码见代码清单16-3。

代码清单16-3 自定义面板函数和额外选项的xyplot

```
library(lattice)
mtcars$transmission <- factor(mtcars$am, levels=c(0,1),
                              labels=c("Automatic",  "Manual"))

panel.smoother <- function(x, y) {
                    panel.grid(h=-1, v=-1)
                    panel.xyplot(x, y)
                    panel.loess(x, y)
                    panel.abline(h=mean(y), lwd=2, lty=2, col="green")
                  }

xyplot(mpg~disp|transmission,data=mtcars,
       scales=list(cex=.8, col="red"),
       panel=panel.smoother,
       xlab="Displacement", ylab="Miles per Gallon",
       main="MGP vs Displacement by Transmission Type",
       sub = "Dotted lines are Group Means", aspect=1)
```

图形结果见图16-4。

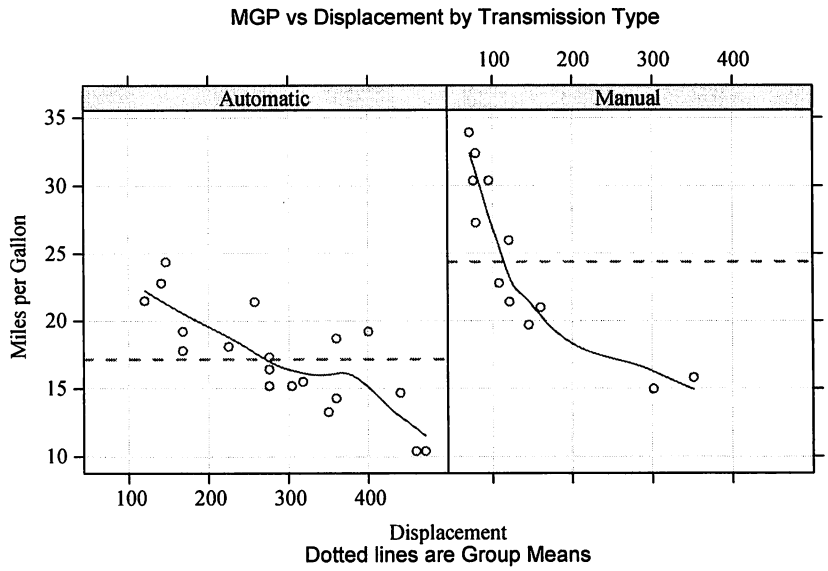


图16-4 以传动类型为条件时每加仑英里数与发动机排量的栅栏图。图中添加了平滑拟合曲线（loess）、网格线和组均值线

新代码中有一些地方需要注意。panel.xyplot()函数绘制了各个点，panel.loess()函

数在每个面板中绘制了非参拟合曲线。panel.abline()函数在条件变量的各个水平下添加了mpg的均值线。（若用h = mean(mtcars$mpg)替换h=mean(y)，那么将只绘制整个样本集的一个mpg均值参考线。）scales =选项将标度的标注修改为红色和80%的默认大小。

在上面的例子中，我们也可使用scales = list(x = list(), y = list())来分别设定横轴和纵轴的选项。参考help(xyplot)可获得更多关于标度选项的细节。下节我们将学习如何将分组观测整合到一起，而不是在各个面板中进行展示。

16.2.3　分组变量

当一个lattice图形表达式含有条件变量时，将会生成在该变量各个水平下的面板。若你想将结果叠加到一起，则可以将变量设定为分组变量（grouping variable）。

假使你想利用核密度图来展示手动挡和自动挡汽车的每加仑英里数的分布情况，可使用如下代码：

```
library(lattice)
mtcars$transmission <- factor(mtcars$am, levels=c(0, 1),
                              labels=c("Automatic", "Manual"))
densityplot(~mpg, data=mtcars,
            group=transmission,
            main="MPG Distribution by Transmission Type",
            xlab="Miles per Gallon",
            auto.key=TRUE)
```

结果见图16-5。group =选项默认将分组变量各个水平下的图形叠加到一起。绘制的点为空心圆圈，线为实线，水平信息用颜色来区分。不过以灰色调输出时，颜色将很难区分。稍后我们将看看如何修改这些默认值。

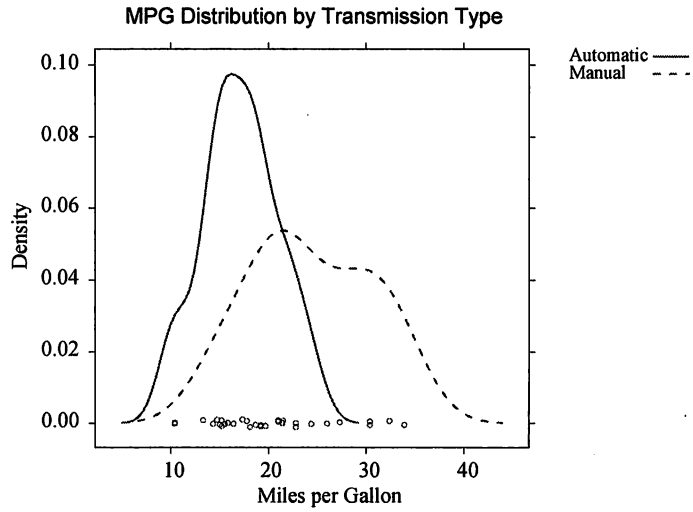


图16-5　以传动类型为分组变量时每加仑英里数的核密度曲线图。水平轴上还绘制了扰动点

注意图例或图例符号不会默认生成。选项auto.key = TRUE将可以创建一个摆放在图形上方的、初步的图例符号，你可将所做的修改以列表形式添加到自动图例符号中。例如：

```
auto.key=list(space="right", columns=1, title="Transmission")
```

将把图例移到图形的右边，并在一个单独的栏中展示符号和图例标题。

若你想对图例进行更多的控制，可使用key =选项。代码清单16-4给出了一个示例，结果见图16-6。

代码清单16-4 自定义图例并含有分组变量的核密度曲线图

```
library(lattice)
mtcars$transmission <- factor(mtcars$am, levels=c(0, 1),
                              labels=c("Automatic", "Manual"))

colors = c("red", "blue")
lines  = c(1,2)
points = c(16,17)

key.trans <- list(title="Trasmission",
                  space="bottom", columns=2,
                  text=list(levels(mtcars$transmission)),
                  points=list(pch=points, col=colors),
                  lines=list(col=colors, lty=lines),
                  cex.title=1, cex=.9)

densityplot(~mpg, data=mtcars,
            group=transmission,
            main="MPG Distribution by Transmission Type",
            xlab="Miles per Gallon",
            pch=points, lty=lines, col=colors,
            lwd=2, jitter=.005,
            key=key.trans)
```

❶ 设定颜色、线和点类型

❷ 自定义图例

❸ 自定义密度图

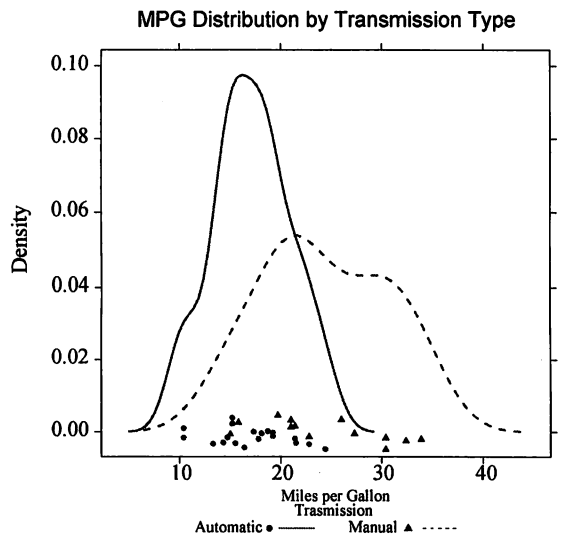


图16-6 以传动类型为分组变量时每加仑英里数的核密度图。已修改图形参数，并添加了一个自定义的图例，包括颜色、形状、线条类型、字符大小和标题的设定

此处，图形符号、线条类型和颜色都设定为向量❶。每个向量的第一个原色都会被应用到分组变量的第一个水平上，第二个元素应用到第二个水平上，以此类推。❷创建了一个图例选项的列表对象。选项设定了图例以两栏形式摆放在图形下方，并包含水平名称、点符号类型、线条类型和颜色。图例标题设置得比符号的文本稍大。

❸中的densityplot()函数使用了相同的绘图符号、线条类型和颜色，同时还增加了线条粗细和扰动程度以改善图形外观。最后，图例符号设置使用的是之前定义的列表值。这种为分组变量设定图例的方式具有很大的灵活性。实际上，你可以创建不止一个图例，并将它们摆放到图形不同的区域（此处不展示）。

本节结束之前，让我们再学习一个分组变量和条件变量同时包含在一幅图形中的例子。数据集使用的是R基础安装中的CO2数据框，它描述的是一个对稗草耐寒度的研究。

数据包含了12个植物（Plant）在七种二氧化碳浓度环境（conc）中的二氧化碳吸收率（uptake）。六个植物来自加拿大的魁北克省，另外六个来自美国的密西西比州。其中每组的三个植物处于严寒环境，另外三个处于非严寒环境。本例中，Plant是分组变量，而Type（魁北克省/密西西比州）和Treatment（严寒/非严寒）是条件变量。代码清单16-5生成的图形见图16-7。

代码清单16-5　包含分组变量和条件变量以及自定义图例的xyplot

```
library(lattice)
colors <- "darkgreen"
symbols <- c(1:12)
linetype <- c(1:3)

key.species <- list(title="Plant",
                    space="right",
                    text=list(levels(CO2$Plant)),
                    points=list(pch=symbols, col=colors))

xyplot(uptake~conc|Type*Treatment, data=CO2,
       group=Plant,
       type="o",
       pch=symbols, col=colors, lty=linetype,
       main="Carbon Dioxide Uptake\nin Grass Plants",
       ylab=expression(paste("Uptake ",
              bgroup("(", italic(frac("umol","m"^2)), ")"))),
       xlab=expression(paste("Concentration ",
              bgroup("(", italic(frac(mL,L)), ")"))),
       sub = "Grass Species: Echinochloa crus-galli",
       key=key.species)
```

注意\n将会使标题分成两行，expression()函数将在坐标轴标签上添加数学符号。此例中将颜色作为分组的区分器，在col =选项中指定了一种颜色。不过添加12种不同的颜色会显得过于复杂，偏离在每个面板中直观展示变量关系的目标。从图中可以清楚地看到，密西西比州的稗草在严寒环境中的二氧化碳吸收率有些不同。

到目前为止，你已经学习了如何通过高级绘图函数中的选项（如xyplot(pch = 17)）以及面板函数中的选项（panel.xyplot(pch = 17)）来修改图形元素。但是这种修改只在函数调用期

间有效，在下节中，我们将学习在整个交互期间或批次运行期间一直有效的图形参数修改方法。

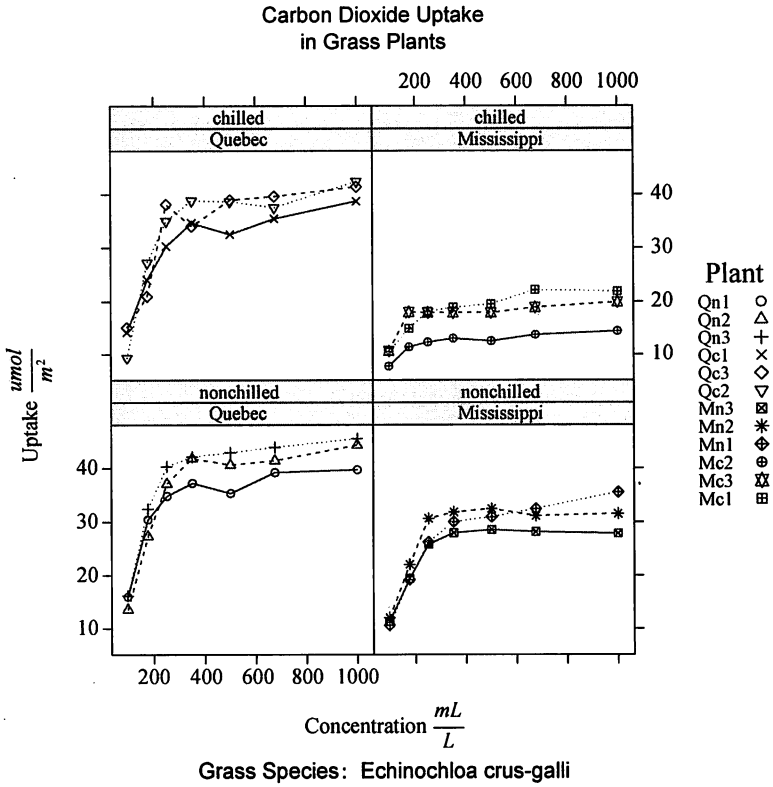


图16-7 xyplot展示了在两种处理条件下，两种类型的12个植物在不同二氧化碳浓度下的二氧化碳吸收率。Plant是分组变量，Treatment和Type是条件变量

16.2.4 图形参数

第3章中，我们学习了如何利用par()函数查看和设置默认的图形参数。不过它们只对R中简单的图形系统生成的图形有效，对于lattice图形来说这些设置是无效的。在lattice图形中，lattice函数默认的图形参数包含在一个很大的列表对象中，你可通过trellis.par.get()函数来获取，并用trellis.par.set()函数来修改。show.settings()函数可展示当前的图形参数设置情况。

以把默认图形符号修改为叠加点（即图形中包含了一个分组变量的点）为例，默认设置是空心圆圈，我们将赋予每组的点以各自的符号。

首先，查看当前的默认设置，并将它们存储到一个mysettings列表中：

```
> show.settings()
> mysettings <- trellis.par.get()
```

然后，查看叠加点的默认设置值：

```
> mysettings$superpose.symbol
$alpha
[1] 1 1 1 1 1 1 1

$cex
[1] 0.8 0.8 0.8 0.8 0.8 0.8 0.8

$col
[1] "#0080ff"   "#ff00ff"   "darkgreen" "#ff0000"   "orange"    "#00ff00"
[7] "brown"

$fill
[1] "#CCFFFF" "#FFCCFF" "#CCFFCC" "#FFE5CC" "#CCE6FF" "#FFFFCC" "#FFCCCC"

$font
[1] 1 1 1 1 1 1 1

$pch
[1] 1 1 1 1 1 1 1
```

此处你可以看到分组变量的每个水平都使用空心圆圈（pch = 1）。定义了7个水平后，图形符号将会被循环使用。

最后，我们再做如下声明：

```
mysettings$superpose.symbol$pch <- c(1:10)
trellis.par.set(mysettings)
show.settings()
```

此时lattice图形将对分组变量的第一个水平使用符号1（空心圆圈），第二个使用符号2（空心三角形），以此类推。另外，我们对分组变量的10个水平的符号都进行了定义，而不是7个。这种图形设置效果将会一直存在，直到关闭图形设备。你可以按照此方式对其他任意图形参数进行修改。

16.2.5　页面摆放

第3章中，我们学习了如何利用par()函数在一个页面中摆放多个图形。由于lattice函数不识别par()设置，因此你需要另辟蹊径。最简单的方法便是先将lattice图形存储到对象中，然后利用plot()函数中的split =或position =选项来进行控制。

split选项将页面分割为一个指定行数和列数的矩阵，然后将图形放置到该矩阵中。split选项的格式为：

```
split=c(placement row, placement column,
    total number of rows, total number of columns)
```

来看以下代码：

```
library(lattice)
graph1 <- histogram(~height|voice.part, data=singer,
                    main="Heights of Choral Singers by Voice Part")
graph2 <- densityplot(~height, data=singer, group=voice.part,
                      plot.points=FALSE, auto.key=list(columns=4))
plot(graph1, split=c(1, 1, 1, 2))
   plot(graph2, split=c(1, 2, 1, 2), newpage=FALSE)
```

它将把第一幅图放置到第二幅图的上面。具体来讲，第一个plot()函数把页面分割成一列两行的矩阵，并将图形放置到第一列、第一行中（自上往下、从左至右地计数）。第二个plot()函数做同样的分割，但是把图形放置到第一列、第二行中。因为plot()函数默认启动一个新的页面，所以你需要禁止该操作，因此设定选项newpage = FALSE。（篇幅所限，未画出图形。）

使用position =选项可以对大小和摆放方式进行更多的控制。考虑如下代码：

```
library(lattice)
graph1 <- histogram(~height|voice.part, data=singer,
                    main="Heights of Choral Singers by Voice Part")
graph2 <- densityplot(~height, data=singer, group=voice.part,
                      plot.points=FALSE, auto.key=list(columns=4))
plot(graph1, position=c(0, .3, 1, 1))
plot(graph2, position=c(0, 0, 1, .3), newpage=FALSE)
```

来看此处的position = c(xmin, ymin, xmax, ymax)，该页面的x-y坐标系统是矩形，x轴和y轴的维度范围都是从0到1，原点（0, 0）在图形左下角。（篇幅所限，未画出图形。）

在lattice图形中你还可以改变面板的顺序。高级绘图函数的index.cond =选项可以设定条件变量水平的顺序。以voice.part因子为例，因子水平有：

```
> levels(singer$voice.part)
[1] "Bass 2"    "Bass 1"    "Tenor 2"   "Tenor 1"   "Alto 2"    "Alto 1"
[7] "Soprano 2" "Soprano 1"
```

添加的index.cond = list(c(2, 4, 6, 8, 1, 3, 5, 7))将把1声部放在一起，随后是2声部。当有两个条件变量时，在列表中包含两个向量即可。在代码清单16-5中，添加的index.cond=list(c(1, 2), c(2, 1))将会翻转图16-7处理方式的顺序。

如果想更深入地了解lattice图形，可以查阅Sarkar（2008）所写的优秀教材，以及相应的网站http://lmdvr.r-forge.r-project.org。栅栏图形的用户手册（http://cm.bell-labs.com/cm/ms/departments/sia/doc/trellis.user.pdf）也是一个非常好的学习资源。

下一节将探究另一个能够全面替代R原生图形系统的包：ggplot2。

16.3 ggplot2 包

ggplot2包提供了一个基于全面而连贯的语法的绘图系统。它弥补了R中创建图形缺乏一致性的缺点，使得用户可以创建有创新性的、新颖的图形类型。

ggplot2中最简单的绘图方式是利用qplot()函数，即快速绘图函数。格式为：

```
qplot(x, y, data=, color=, shape=, size=, alpha=, geom=, method=, formula=,
    facets=, xlim=, ylim=, xlab=, ylab=, main=, sub=)
```

表16-4列出了上述参数/选项的定义。

表16-4 *qplot*选项

选　项	描　述
alpha	元素重叠的alpha透明度，数值为0（完全透明）到1（完全不透明）间的分数

（续）

选　项	描　述
color、shape、size、fill	把变量的水平与符号颜色、形状或大小联系起来。对于直线图，colo将把线条颜色与变量水平联系起来，对于密度图和箱线图，fill将把填充颜色与变量联系起来。图例将会被自动绘制
data	指定一个数据框
facets	指定条件变量，创建一个栅栏图。表达式如rowvar ~ colvar（示例见图16-10）。为创建一个基于单条件变量的栅栏图，可用rowvar ~ .或. ~ colvar
geom	设定定义图形类型的几何形状。geom选项是一个单条目或多条目的字符型向量，包括"point"、"smooth"、"boxplot"、"line"、"histogram"、"density"、"bar"和"jitter"
main、sub	字符向量，设定标题和副标题
method、formula	若geom = "smooth"，则会默认添加一条平滑拟合曲线和置信区间。当观测数大于1000时，便需要调用更高效的平滑拟合算法。方法包括回归lm、广义可加模型gam、稳健回归rlm。formula参数指定拟合的形式 例如，要添加简单的回归曲线，则设定geom = "smooth", method = "lm", formula = y ~ x。将表达式改为y ~ poly(x, 2)将生成二次拟合。注意表达式使用的是字母x和y，而不是变量的名称 对于method = "gam"，一定要记得加载mgcv包。对于method = "rml"，则需加载MASS包
x、y	指定摆放在水平轴和竖直轴的变量。对于单变量图形（如直方图），则省略y
xlab、ylab	字符向量，设定横轴和纵轴标签
xlim、ylim	二元素数值型向量，分别指定横轴和纵轴的最小值和最大值

下面通过一些例子来看看*qplot()*的工作原理。如下代码创建了一个以气缸数为条件的每加仑英里数的箱线图。真实数据点都相互叠加（添加扰动以减少重叠），箱线图的颜色依据气缸数而变化。

```
library(ggplot2)
mtcars$cylinder <- as.factor(mtcars$cyl)
qplot(cylinder, mpg, data=mtcars, geom=c("boxplot", "jitter"),
      fill=cylinder,
      main="Box plots with superimposed data points",
      xlab= "Number of Cylinders",
        ylab="Miles per Gallon")
```

图形结果见图16-8。

第二个例子，我们来创建一个以车重为条件的每加仑英里数的散点图矩阵，利用颜色和符号形状区分自动挡和手动挡汽车。另外，我们还将对每种传动类型添加各自的回归线和置信区间带。

```
library(ggplot2)
transmission <- factor(mtcars$am, levels=c(0, 1),
                       labels=c("Automatic",  "Manual"))
qplot(wt,mpg, data=mtcars,
      color=transmission, shape=transmission,
      geom=c("point", "smooth"),
```

```
method="lm", formula=y~x,
xlab="Weight", ylab="Miles Per Gallon",
main="Regression Example")
```

图形结果见图16-9。这种类型的图形非常实用，但用其他软件包却并不容易做出这样的图。

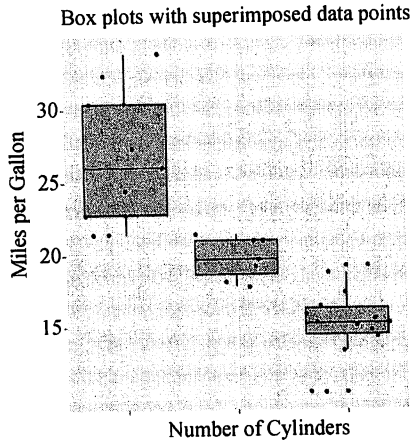


图16-8 以气缸数为条件的汽车英里数箱线图。数据点是重叠的，因此添加了扰动

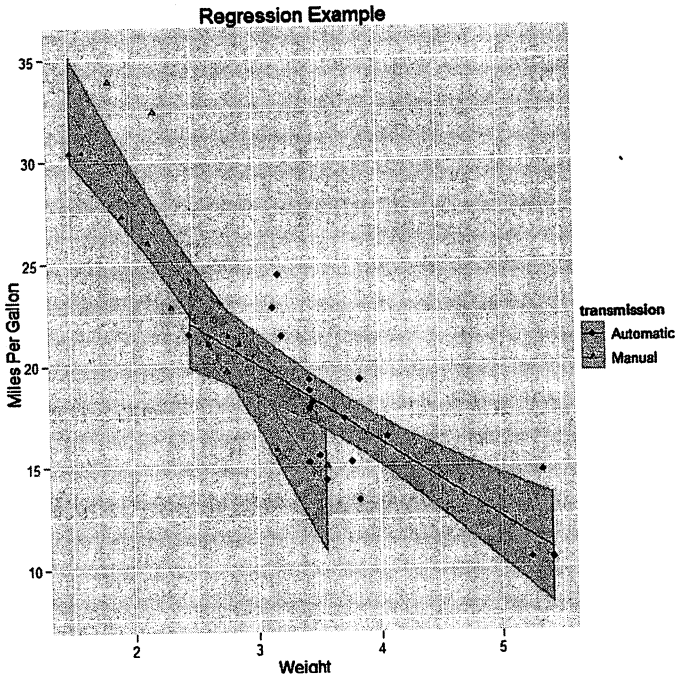


图16-9 汽车英里数和车重间的散点图，依据发动机的传动类型（手动挡，自动挡）分别添加了回归线和置信区间带

第三个例子，我们将创建一个分面（栅栏）图。每个分面（面板）展示了车重与每加仑英里数的散点图。传动类型定义了行分面，而气缸数则定义了列分面。数据点的大小代表了汽车马力的评分。

```
library(ggplot2)
mtcars$cyl <- factor(mtcars$cyl, levels=c(4, 6, 8),
                     labels=c("4 cylinders", "6 cylinders", "8 cylinders"))
mtcars$am <- factor(mtcars$am, levels=c(0, 1),
                    labels=c("Automatic",  "Manual"))
qplot(wt,mpg, data=mtcars, facets=am~cyl, size=hp)
```

图形结果见图16-10。可以看到利用ggplot2创建复杂的图形（实际上是一个气泡图）是多么容易。你还可以尝试对函数添加形状和颜色选项，来看看图形结果有何变化。

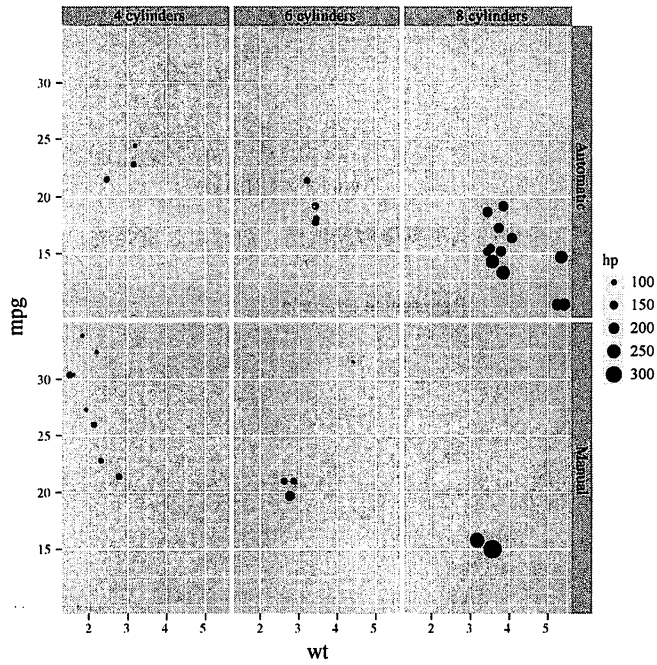


图16-10　车重和汽车英里数的散点图，依据传动类型（手动挡、自动挡）和气缸数（4、6和8）进行分面。符号大小表示马力值

在本节最后，我们再次对本章开始处的singer数据进行绘图。代码如下，图形结果见图16-11。

```
library(ggplot2)
data(singer, package="lattice")
qplot(height, data=singer, geom=c("density"),
      facets=voice.part~., fill=voice.part)
```

以这种方式来比较身高分布比用图16-1所示的方式更为容易。（当然，如果是彩色的，效果会更好。）

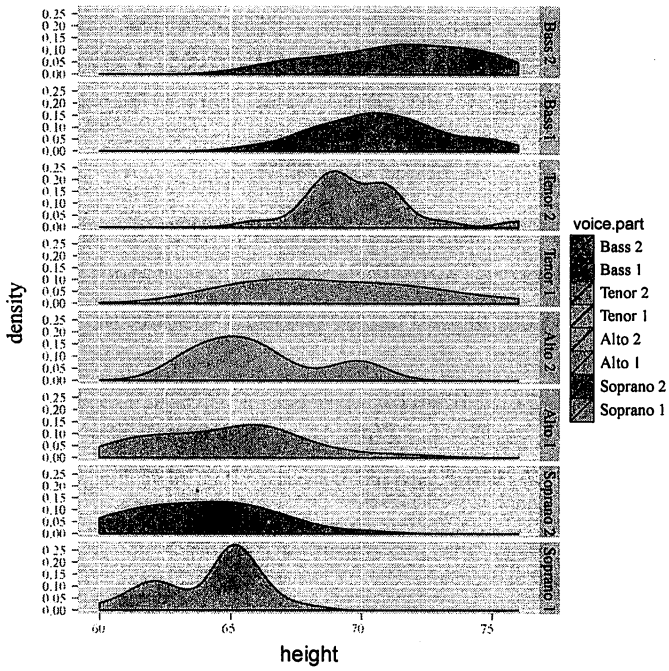


图16-11 依据声部分面的歌手身高密度图

到目前为止，其实我们仅仅了解了这个强大绘图系统的一点皮毛。对它感兴趣的读者可以参考Wickham (2009)和ggplot2网站（http://had.co.nz/ggplot2/），其中有更详细的介绍。本章最后将介绍一些交互式图形以及相关的R函数。

16.4 交互式图形

R的基础安装提供了有限的图形交互功能。虽然可以通过添加额外的程序代码修改图形，但是很少能通过鼠标修改图形或收集新的信息。不过，好在R中有一些软件包可以极大增强与图形的交互能力。本节我们重点关注playwith、latticist、iplot和rggobi包提供的函数。在第一次使用它们时，请确保已经下载并安装。

16.4.1 与图形交互：鉴别点

在接触一些专门的软件包前，我们先学习R基础安装中一个可对散点图中的点进行鉴别和标注的函数：identify()。利用该函数，你可用鼠标对散点图中所选择的点标注行数或者行名称，直到你选择了Stop或者右击图形识别工作才会停止。例如，运行以下代码：

```
plot(mtcars$wt, mtcars$mpg)
identify(mtcars$wt, mtcars$mpg, labels=row.names(mtcars))
```

光标将从一个点变成一个十字。单击散点图上的点，可以对它们进行标注，直到你从Graphics

Device（图形设备）菜单中选择了Stop，或者右击了图形并从右键菜单中选择了Stop。

许多包中的图形函数（包括第8章讨论过的car包中的函数）都可应用该方法来对点进行标注。但遗憾的是，对于lattice或ggplot2图形，identify()函数无效。

16.4.2 playwith

playwith包提供了一个GTK+图形用户界面（GUI），使得用户可以编辑R图形并与其交互。输入代码install.packages("playwith", depend = TRUE)即可在任何平台上安装playwith包。对于Mac OS X和Linux平台，最好也装上JGR图形用户界面（见附录A），然后在这个GUI中运行playwith。

playwith()函数允许用户识别和标注点、查看一个观测所有的变量值、缩放和旋转图形、添加标注（文本、箭头、线条、矩形、标题和标签）、修改视觉元素（颜色、文本大小等）、应用先前存储的图形风格，以及以多种格式输出图形结果。下面的例子很好地展示了该函数的功能：

```
library(playwith)
library(lattice)

playwith(
   xyplot(mpg~wt|factor(cyl)*factor(am),
          data=mtcars, subscripts=TRUE,
          type=c("r", "p"))
)
```

图16-12所示的窗口将会出现在屏幕上。该GUI非常清晰易懂，你可以试试左边的按钮以及菜单项。与identify()函数不同，playwith()既对R基础图形有效，也对lattice和ggplot2图形有效。Theme（主题）菜单上的一些选项仅与基础图形契合的很好，一些则与ggplot2图形契合的较好（如标注），还有些对ggplot2图形无效（如识别点）。

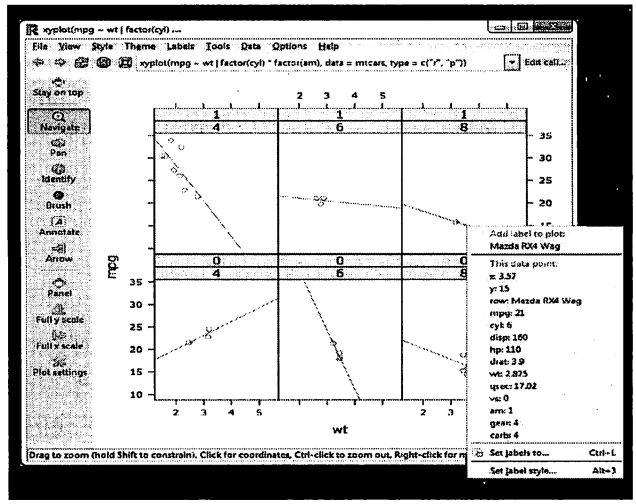


图16-12　playwith窗口。依赖于GTK+ GUI，用户可以使用鼠标编辑图形

想详细了解playwith包，可访问项目网站http://code.google.com/p/playwith/。

16.4.3 latticist

使用latticist包，你便可通过栅栏图方式探索数据集。该包不仅提供了一个如16.2节图形那样的图形用户界面，也可以通过vcd包来创建新的图形（见11.4节）。如果有需要，latticist还能与playwith整合到一起，例如代码：

```
library(latticist)
mtcars$cyl <- factor(mtcars$cyl)
mtcars$gear <- factor(mtcars$gear)
latticist(mtcars, use.playwith=TRUE)
```

生成的界面如图16-13所示。

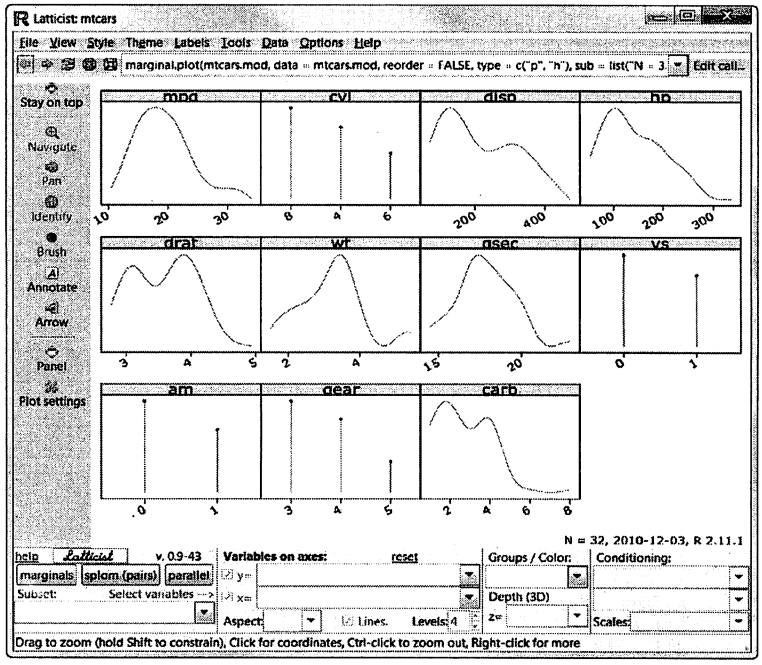


图16-13 拥有latticist函数功能的playwith窗口。用户可创建lattice并与vcd图形交互

除了拥有playwith的函数功能（识别点、标注、缩放、旋转和风格化），用户还能通过下拉菜单和按钮直接创建lattice图形。欲详细了解latticist包，可参考http://code.google.com/p/latticist/。

通过一个面向R的流行GUI——Deducer（见附录A）的插件Plot Builder，用户也可以与ggplot2图形进行交互。由于它无法在R平台运行，因此此处我们不加讨论。若你感兴趣，可访问Deducer网站www.deducer.org。

16.4.4 iplots包的交互图形

playwith和latticist包只能与单幅图形交互，而iplots包提供的交互方式则有所不同。该包提供了交互式马赛克图、柱状图、箱线图、平行坐标图、散点图和直方图，以及颜色刷，并可将它们结合在一起绘制。这意味着你可通过鼠标对观测点进行选择和识别，并且对其中一幅图形的观测点突出显示时，其他被打开的图形将会自动突出显示相同的观测点。另外，你还可通过鼠标来收集图形对象（诸如点、条、线）和箱线图的信息。

iplots包是通过Java编写实现的，表16-5列出了该包中主要的函数。

表16-5　*iplot*函数

函　数	描　述
ibar()	交互式柱状图
ibox()	交互式箱线图
ihist()	交互式直方图
imap()	交互式地图
imosaic()	交互式马赛克图
ipcp()	交互式平行坐标图
iplot()	交互式散点图

为更好理解iplots的工作机理，可运行代码清单16-6中的代码。

代码清单16-6　iplots展示

```
library(iplots)
attach(mtcars)
cylinders <- factor(cyl)
gears <- factor(gear)
transmission <- factor(am)
ihist(mpg)
ibar(gears)
iplot(mpg, wt)
ibox(mtcars[c("mpg", "wt", "qsec", "disp", "hp")])
ipcp(mtcars[c("mpg", "wt", "qsec", "disp", "hp")])
imosaic(transmission, cylinders)
detach(mtcars)
```

六个含有图形的窗口将会打开。为使窗口均可见，可在桌面上重新安排它们的顺序（若有需要还可重调各图的大小）。部分展示如图16-14所示。

现在尝试以下步骤。

- 单击柱状图（gears）窗口的三号齿轮条，直条将会变红色。另外，其他图形窗口中的所有三齿轮发动机都会被突出显示。
- 鼠标下移，并在散点图（wt对mpg）窗口选择一个含有点的矩形区域。这些点将会被突出显示，而其他图形窗口中相应的观测点也将会变成红色。

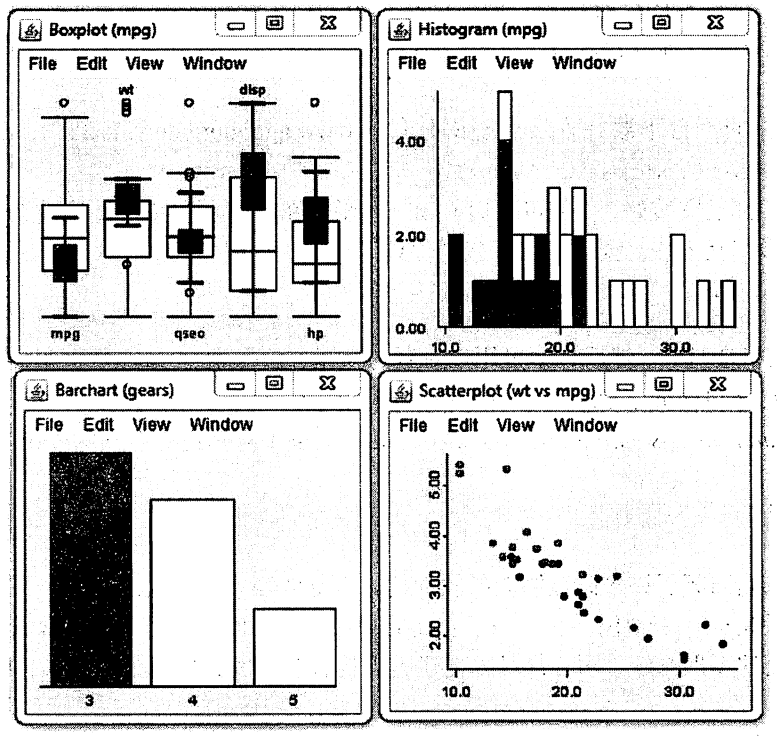


图16-14 代码清单16-6所创建的iplots图形。为节省空间，此处只展示了六个图形窗口中的四个。这些图形中，用户已经在柱状条窗口中单击了三号齿轮条

- 按住Ctrl键不动，将鼠标移动到某幅图形中点、条、箱线图或线上，该对象的详细信息将会在一个弹出窗口中显示出来。
- 右击任何对象，便可在右键菜单中获得一些选项。例如，你可以右击箱线图（mpg）窗口，将图形转变为一个平行坐标图（PCP）。
- 拖动鼠标可选择不止一个对象（点、条等），或使用Shift键通过单击选择不邻接的对象。你可尝试在柱状图（gears）窗口选择三号和五号齿轮条。

iplots包中的函数可用来探索变量分布和交互选择的观测子集中的变量关系。若用其他方式来做如此探索，那将是一件困难和耗时耗力的工作。有关iplots包的更多信息，请访问项目网站http://rosuda.org/iplots/。

16.4.5 rggobi

作为交互图形的最后一个例子，我们来看看R平台之外的开源软件——GGobi（www.ggobi.org），它是一个全面的高维数据可视化和动态探索的软件，在Windows、Mac OS X和Linux平台上都可安装。GGobi有许多吸引眼球的优点，包括：交互式散点图、柱状图、平行坐标图、时间序列图、

散点图矩阵和三维旋转的综合使用；窗口刷和点识别；多变量变换方法；复杂的探索平台，如导向动画的和手动的1维及2维图形。令人振奋的是，rggobi软件包为GGobi和R提供了一个无缝接口。

首先根据你的平台下载并安装合适的软件（www.ggobi.org/downloads/），然后在R中安装rggobi包：install.packages("rggobi", depend = TRUE)。

当两个软件都已安装好，你便可利用ggobi()函数在R中运行GGobi。它将为你的R数据提供许多复杂的图形交互方法。要了解实际效果，请运行以下代码：

```
library(rggobi)
g <- ggobi(mtcars)
```

GGobi界面将会打开，然后你便可用最时髦的交互方法探索mtcars数据集。欲了解更多，可在GGobi网站上查阅简介、教程、手册和教学视频。Cook和Swayne的*Interactive and Dynamic Graphics for Data Analysis with R and GGobi*（2008）一书中对其也有全面的介绍。

16.5　小结

本章中，我们回顾了许多高级制图的软件包。首先是lattice包，它提供了一个可创建栅栏图的系统；然后是ggplot2包，它有一个全面的图形语法。两个包都是为了改善R基础图形所设计的完整、全面的图形系统，两者都可以创建美观且有意义的数据可视化图形，而这很难用其他方式实现。

随后，我们探究了一些可与图形动态交互的软件包，包括playwith、latticist、iplots和rggobi。有了这些包，你就可以在图形中直接与数据进行交互，增加了进一步发现数据规律的机会。

到目前为止，相信你已经掌握了R中实现数据可视化的许多方法。如果说“一图胜千言”，而R提供了绘制一幅图形的一千种方法，那么R便胜过一百万文字了。这些资源得来不易，它们都是R开发团队无私劳动和软件包作者千百个小时辛勤付出的成果。向他们致敬！

后记：探索R的世界

在这本书里面我们已经介绍了R的方方面面，主要内容包括R开发环境、数据管理、传统的统计模型和统计图形。我们还涉及了一些较高阶的内容，例如重抽样统计、缺失值插补和交互式图形。但R最强大的地方（也有可能是最让人头疼的地方）就是，其中永远都有学不完的东西。

R是一个庞大、健壮而且在不断进化的统计平台和编程语言。面对无数的新软件包、频繁的更新以及新的发展方向，用户怎么才能屹立潮头？幸运的是，很多网站支持着这个活跃的社区，提供从平台到软件包更新、新的使用方法到各种教程等各种跟R有关的内容。下面列出一些我最喜欢的网站[1]。

- The R Project（http://www.r-project.org/）
  这是R的官方网站，也是进入R世界的第一站。网站上有丰富的文档，包括*An Introduction to R*[2]、*The R Language Definition*[3]、*Writing R Extensions*、*R Data Import/Export*[4]、*R Installation and Administration*以及*The R FAQ*。
- The R Journal (http://journal.r-project.org/)
  这是一个免费期刊，每篇文章都经过评审，内容包括R项目本身以及各种软件包。
- R Bloggers (http://www.r-bloggers.com/)
  这是一个博客聚合网站，其中内容来自跟R有关的博客，每天都会有新的文章。这是我每天必去的网站。
- Planet R (http://planetr.stderr.org)
  这也是一个优秀的聚合网站，其中有各种来源的信息。每天更新。
- CRANberries (http://dirk.eddelbuettel.com/cranberries/)
  这个网站聚合了关于新软件包和软件包更新的消息，提供了每个包在CRAN上的链接。
- R Graph Gallery (http://addictedtor.free.fr/graphiques/)
  收集了各种新颖的图形，以及相应的源代码。
- R Graphics Manual (http://bm2.genes.nig.ac.jp/)
  收集了所有R包的图形，根据图形主题、包名称和函数组织。我最近一次访问时上面至少

---

① 译者常去的较活跃的R语言中文网站是统计之都（http://cos.name）。——译者注

② 中文版《R导论》由丁国徽博士翻译，但版本较老。——译者注

③ 中文版《R语言定义》由丁国徽博士翻译，但版本较老。——译者注

④ 中文版《R数据的导入和导出》由丁国徽博士翻译，但版本较老。——译者注

有35 000张图片！

- Journal of Statistical Software (http://www.jstatsoft.org/)
  这也是一份免费期刊，文章都是经过评审的，包括原创文章、书评和关于统计计算的代码片段。其中大部分文章是关于R的。
- Revolutions (http://blog.revolution-computing.com/)
  这是一个广受欢迎、条理明晰的博客，专注于跟R有关的新闻和信息。
- CRAN Task Views (http://cran.r-project.org/web/views/)
  通过任务视图（task view）可以看到R在各种学术和研究领域的应用情况。每个任务视图都介绍了一个领域中的包和方法。现在总共有28个任务视图（详见下表）。

CRAN任务视图	
Bayesian Inference	Machine Learning & Statistical Learning
Chemometrics and Computational Physics	Medical Image Analysis
Design, Monitoring, and Analysis of Clinical Trials	Multivariate Statistics
Clinical Trial Design, Monitoring, and Analysis	Natural Language Processing
Cluster Analysis & Finite Mixture Models	Official Statistics & Survey Methodology
Probability Distributions	Optimization and Mathematical Programming
Computational Econometrics	Analysis of Pharmacokinetic Data
Analysis of Ecological and Environmental Data	Phylogenetics, Especially Comparative Methods
Design of Experiments (DoE)	Psychometric Models and Methods
Empirical Finance	Robust Statistical Methods
Statistical Genetics	Statistics for the Social Sciences
Graphic Displays & Dynamic Graphics	Analysis of Spatial Data
gRaphical Models in R	Survival Analysis
High-Performance and Parallel Computing with R	Time Series Analysis

- R-Help Main R Mailing List (https://stat.ethz.ch/mailman/listinfo/r-help)
  电子邮件列表是问问题的最佳场所。邮件列表的存档也是可以搜索的。但在问问题之前请先仔细阅读FAQ。
- Quick-R (http://www.statmethods.net)
  这是我的网站。其中包括80篇关于R的简要教程。不多说，我得低调点。

R社区是一个乐于助人、生机勃勃、激情四射的社区。欢迎来到这个神奇的世界！

附录 A

图形用户界面

A

你是不是拿到本书首先就翻到这里来了？默认情况下，R只提供了一个简单的CLI（Command Line Interface，命令行界面）。用户在命令行提示符（默认是>）后面输入命令，每次执行一个命令。对于很多数据分析师而言，R的命令行界面是最大的一个缺点。

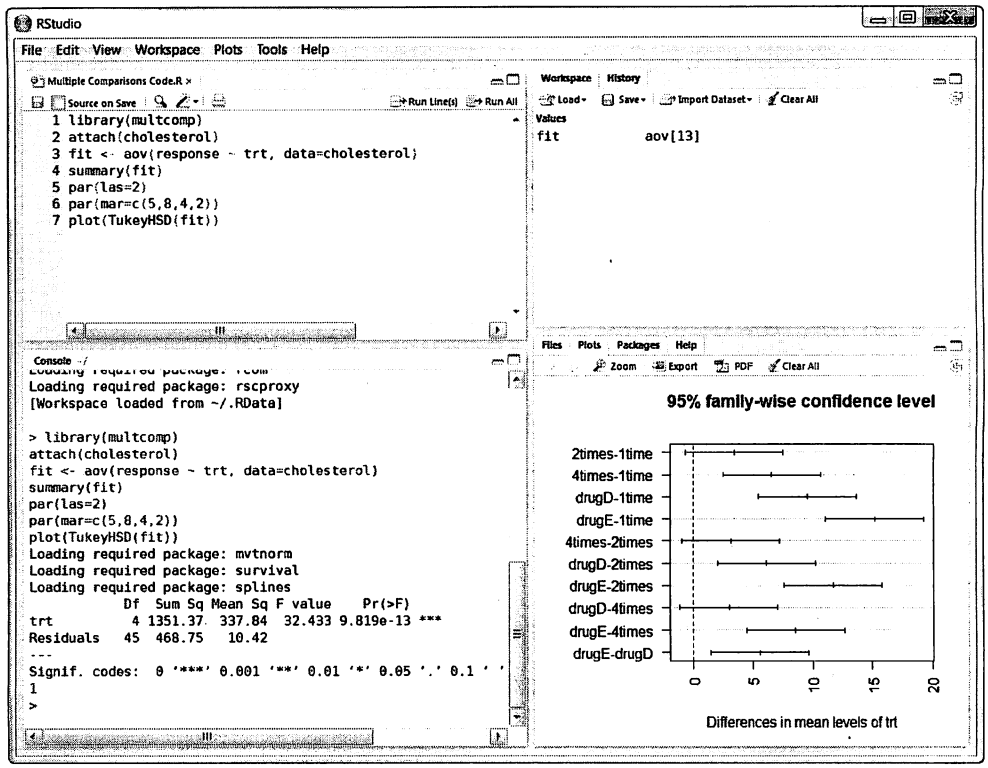
已经有不少R的图形界面，包括跟R交互的代码编辑器（例如RStudio）、特定软件包或函数的GUI（例如BiplotGUI），以及用户可以通过菜单和对话框完成数据分析的完整GUI（例如R Commander）。

表A-1中列出了一些比较有用的代码编辑器。

表A-1　集成开发环境和语法编辑器

名　称	链　接
带StatET插件的Eclipse	http://www.eclipse.org和http://www.walware.de/goto/statet
ESS（Emacs Speaks Statistics）	http://ess.r-project.org/
带SciViews-K插件的Komodo Edit	http://www.activestate.com/komodo_edit/ http://www.sciviews.org/SciViews-K/
JGR	http://www.rforge.net/JGR/
RStudio	http://www.rstudio.org
Tinn-R（只用于Windows）	http://www.sciviews.org/Tinn-R/
带NppToR插件的Notepad++（只支持Windows）	http://notepad-plus-plus.org/ http://sourceforge.net/projects/npptor/

表A-1中的代码编辑器可用于编辑和执行R代码，功能包括语法高亮、命令补全、对象浏览、项目管理和在线帮助。图A-1是RStudio的截图。



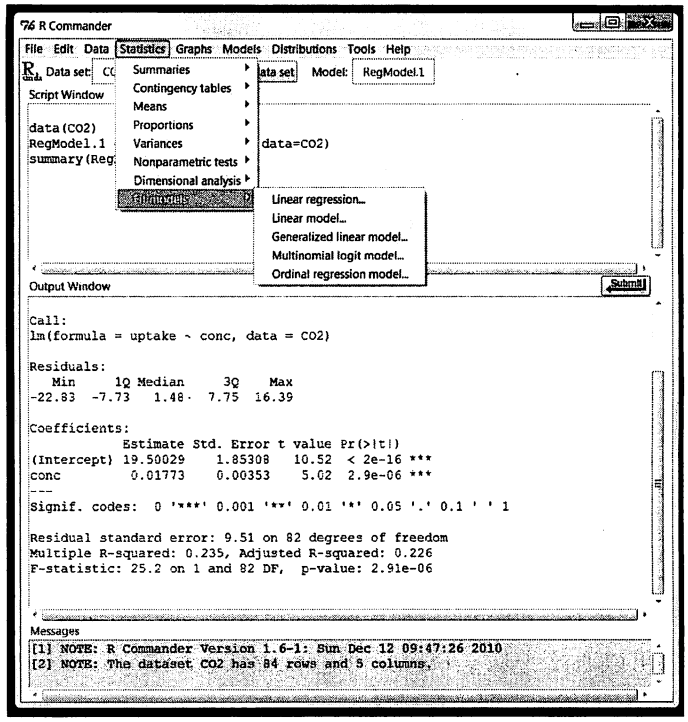
图A-1　RStudio IDE

表A-2中列出了一些成熟的R GUI。跟SAS和IBM SPSS的GUI相比，这些GUI的功能没有那么丰富，也没有那么成熟，但是它们发展很快。

表A-2　R的全功能GUI

名　称	链　接
JGR/Deducer	http://ifellows.ucsd.edu/pmwiki/pmwiki.php?n=Main.DeducerManual
R AnalyticFlow	http://www.ef-prime.com/products/ranalyticflow_en/
Rattle(用于数据挖掘)	http://rattle.togaware.com/
R Commander	http://socserv.mcmaster.ca/jfox/Misc/Rcmdr/
Red R	http://www.red-r.org/
Rkward	http://rkward.sourceforge.net/

在统计学入门课程中，我最喜欢的R GUI是R Commander（见图A-2）。



图A-2 R Commander GUI

最后要介绍的是一些用于给R函数（包括用户自己写的函数）创建GUI的程序。这类程序有R GUI Generator（RGG，参见http://rgg.r-forge.r-project.org/)和CRAN上的`fgui`和`twiddler`包。

R的各种GUI项目发展很快。更多的相关信息请访问R GUI Projects网页：http://www.sciviews.org/_rgui/。

附录 B

自定义启动环境

B

程序员最喜欢做的一件事情就是根据自己的工作习惯自定义启动环境。通过自定义启动环境可以设置R选项、设置工作目录、加载常用的包、加载用户编写的函数、设置默认的CRAN下载网站以及执行其他各种常见任务。

读者可以通过站点初始化文件（Rprofile.site）或目录初始化文件（.Rprofile）自定义R的环境。R在启动时会执行这样几个文本文件中的代码。

在启动时，R会加载*R_HOME*/etc目录中的Rprofile.site文件，其中*R_HOME*是一个环境变量。然后R会在当前目录中寻找.Rprofile文件。如果R没有在当前目录中找到这个文件，它就会到用户的主目录中去寻找。可以通过`Sys.getenv("R\_HOME")`、`Sys.getenv("HOME")`和`getwd()`来分别确认*R_HOME*、*HOME*和当前工作目录。

可以在这些文件中放入两个特殊函数。每个R会话开始时都会执行`.First()`函数，而每个会话结束时都会执行`.Last()`函数。代码清单B-1中是一个Rprofile.site文件的例子。

代码清单B-1　Rprofile.site文件示例

```
options(papersize="a4")
options(editor="notepad")
options(pager="internal")
options(tab.width = 2)
options(width = 130)
options(graphics.record=TRUE)
options(show.signif.stars=FALSE)

options(prompt="> ")
options(continue="+ ")

.libPaths("C:/my_R_library")

local({r <- getOption("repos")
     r["CRAN"] <- "http://cran.case.edu/"
     options(repos=r)})

.First <- function(){
 library(lattice)
 library(Hmisc)
 source("C:/mydir/myfunctions.R")
```

设置常用选项

设置R交互提示符

设置本地库路径

设置默认的CRAN镜像

启动函数

```
 cat("\nWelcome at", date(), "\n")
}

.Last <- function(){
 cat("\nGoodbye at ", date(), "\n")
}
```

会话结束函数

这个文件中有以下几点需要提醒大家注意。

- 设置.libPaths值可以为R目录树之外的扩展包创建一个本地库。这可以用于在升级时保持某个扩展包不变。
- 设置默认的CRAN镜像就不必在每次执行install.packages()命令时都选择镜像了。
- .First()函数中可以加载你常用的库，也可以加载保存自己编写的常用函数的源代码文件。
- .Last()函数中可以执行某些清理操作，包括保存命令历史记录、保存程序输出和保存数据文件等。

还有其他自定义启动环境的一些方法，包括使用命令行选项和环境变量。详见help(Startup)和*Introduction to R*手册的附录B（http://cran.r-project.org/doc/manuals/R-intro. pdf ）。

附录C 从R中导出数据

在第2章中，我们介绍了各种将数据导入R的方法。但有时候你可能要做相反的事情——把R中的数据导出去——以实现数据的保存或者是在外部程序中使用。在本附录中，你会学到如何将R的对象输出到符号分隔的文本文件、Excel电子表格或者其他统计学程序（例如SPSS、SAS和Stata）。

C.1 符号分隔文本文件

可以用`write.table()`函数将R对象输出到符号分隔文件中。函数使用方法是：

```
write.table(x, outfile, sep=delimiter, quote=TRUE, na="NA")
```

其中x是要输出的对象，*outfile*是目标文件。例如，这条语句：

```
write.table(mydata, "mydata.txt", sep=",")
```

会将`mydata`数据集输出到当前目录下逗号分隔的mydata.txt文件中。用路径（例如c:/myprojects/mydata.txt）可以将输出文件保存到任何地方。用`sep="\t"`替换`sep=","`，数据就会保存到制表符分隔的文件中。默认情况下，字符串是放在引号（`""`）中的，缺失值用NA表示。

C.2 Excel电子表格

`xlsx`包中的`write.xlsx()`函数可以将R数据框写入到Excel 2007文件中。使用方法是：

```
library(xlsx)
write.xlsx(x, outfile, col.Names=TRUE, row.names=TRUE,
           sheetName="Sheet 1", append=FALSE)
```

例如，这条语句：

```
library(xlsx)
write.xlsx(mydata, "mydata.xlsx")
```

会将`mydata`数据框保存到当前目录下的Excel文件mydata.xlsx的工作表（默认是`Sheet 1`）中。默认情况下，数据集中的变量名称会被作为电子表格头部，行名称会放在电子表格的第一列。函数会覆盖已存在的mydata.xlsx文件。

`xlsx`包是一个操作Excel 2007文件的强大工具，详见该扩展包的文档。

C.3 统计学程序

foreign包中的write.foreign()可以将数据框导出到外部统计软件。这会创建两个文件，一个是保存数据的文本文件，另一个是指导外部统计软件导入数据的编码文件。使用方法如下：

```
write.foreign(dataframe, datafile, codefile, package=package)
```

例如，下面这段代码：

```
library(foreign)
write.foreign(mydata, "mydata.txt", "mycode.sps", package="SPSS")
```

会将mydata数据框导出到当前目录的纯文本文件mydata.txt中，同时还会生成一个用于读取该文本文件的SPSS程序mycode.sps。package参数的其他值有"SAS"和"Stata"。

关于从R中导出数据的更多信息可以阅读“R Data Import/Export”文档，地址是：http://cran.r-project.org/doc/manuals/R-data.pdf 。

附录 D 制作出版级品质的输出

在完成统计分析，或者画出图形后，研究还没有结束。我们还需要将结果融入到报告中，把我们的发现告诉教师、导师、客户、政府机构或者是期刊编辑。R可以创建一流的图形，但文字的输出却异常古老——等宽文字组成的表格，每一列通过空格实现对齐。

在R中创建出版质量的报告有两种常用的方法：Sweave和odfWeave。`Sweave`包可以将R代码及其输出嵌入到LaTeX文档中，从而得到PDF、PostScript和DVI格式的高质量排版报告。Sweave是一个优雅、精确而且很灵活的系统，但它要求作者熟悉LaTeX编码。

类似地，`odfWeave`包可以将R代码及输出嵌入到ODF（Open Documents Format，开放文档格式）的文档中。然后我们可以用ODF文字处理软件进一步地编辑这些报告，例如OpenOffice Writer，然后再保存为ODF或微软Word格式。这种处理方法没有Sweave那么灵活，但无需去学习LaTeX。我们会分别介绍这两种方法。

D.1 用Sweave（R+LaTeX）实现高质量排版

LaTeX是一个实现高质量排版的文档准备系统（http://www.latex-project.org），在Windows、Mac和Linux平台上都是免费的。作者在文本文件中利用个标记代码实现内容的格式化，然后用LaTeX编译器处理文档，最终得到PDF、PostScript或DVI格式的文档。

利用`Sweave`包可以将R代码及其输出（包括图形）嵌入到LaTeX文档中。步骤如下。

(1) 用文本编辑器创建一个叫做noweb文件的文档（通常后缀是.Rnw）。这个文件中包含报告的内容、LaTeX标记代码和R代码段。每一段R代码都以`<<>>=`开头，以`@`符号结束。

(2) `Sweave()`函数处理noweb文件，生成LaTeX文件。在这一步，R代码会被执行，然后根据设置用符合LaTeX格式的R代码和输出结果替换原来的R代码。这一步可以在R中完成，也可以在命令行中完成。

在R中是这样：

```
Sweave("infile.Rnw")
```

默认情况下，`Sweave("example.Rnw")`会从当前工作目录中读取example.Rnw文件，然后将example.tex文件输出到同一目录中。此外，也可以这样：

```
Sweave("infile.Rnw", syntax="SweaveSyntaxNoweb")
```

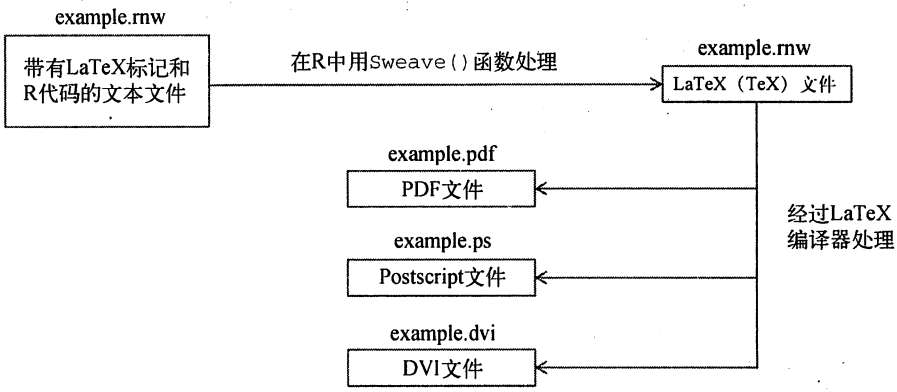
通过设置syntax选项可以避免一些常见的解析错误，以及跟R2HTML包之间的冲突。

在命令行中进行操作的具体过程取决于所使用的操作系统。例如，在Linux系统上，命令是这样的：

```
$ R CMD Sweave infile.Rnw
```

(3) 然后用LaTeX编译器处理这个LaTeX文件，创建PDF、PostScript或DVI文件。流行的LaTeX编译器有Linux平台上的TeX Live、Mac平台上的MaxTeX和Windows平台上的proTeXt。

图D-1中是整个过程的框架。



图D-1 用Sweave生成出版质量报告的流程

前面说过，每一段R代码都在<<>>=和@符号中。可以在<<>>=中用各种选项控制相应R代码的处理方法。例如：

```
<<echo=TRUE, results=HIDE>>=
summary(lm(Y~X, data=mydata))
@
```

就只会输出代码，而不会输出结果，而：

```
<<echo=FALSE, fig=TRUE>>=
plot(A)
@
```

就不会显示代码，只会显示输出中的图片。表D-1中列出了常见的选项。

表D-1 R代码块的常见选项

选 项	描 述
echo	输出中包含代码（echo=TRUE）或不包含（echo=FALSE）。默认是TRUE
eval	用eval=FALSE让代码不被求值或运行。默认是TRUE
fig	当输出是图形时用fig=TRUE。默认是FALSE
results	包含R代码输出（results=verbatim）、不包含输出（results=hide），或者是包含输出并假定其中有LaTeX标记（results=tex）。默认是verbatim。如果输出是用xtable包中的xtable()函数或Hmisc中的latex()函数生成的，就应该用results=tex

默认情况下，Sweave会添加LaTeX标记代码让数据框、矩阵和向量的格式更加美观。此外，可以用\Sexpr{}语句嵌入R对象。要注意，lattice图形必须嵌入到print()语句中才能正确处理。

xtable包中的xtable()函数可以更精确地格式化数据框和矩阵。此外，它还可以用于格式化其他R对象，包括lm()、glm()、aov()、table()、ts()和coxph()函数生成的对象。用method(xtable)可以看到完整的列表。在用xtable()格式化R输出时，要确保在代码块选项中使用results=tex选项。

看一个例子就明白了。代码清单D-1中是一个noweb文件。这实际上是8.3节中单因子ANOVA分析的例子。LaTeX标记代码是以反斜杠（\）开头的。\Sexpr{}是一个例外，这是一个Sweave的语句。跟R有关的代码用加粗的斜体表示。

代码清单D-1　示例noweb文件（example.nrw）

```
\documentclass[12pt]{article}
\title{Sample Report}
\author{Robert I. Kabacoff, Ph.D.}
\date{}
\begin{document}
\maketitle

<<echo=false, results=hide>>=
library(multcomp)
library(xtable)
attach(cholesterol)
@

\section{Results}

Cholesterol reduction was assessed in a study
that randomized \Sexpr{nrow(cholesterol)} patients
to one of \Sexpr{length(unique(trt))} treatments.
Summary statistics are provided in
Table \ref{table:descriptives}.

<<echo = false, results = tex>>=
descTable <- data.frame("Treatment" = sort(unique(trt)),
   "N"    = as.vector(table(trt)),
   "Mean" = tapply(response, list(trt), mean, na.rm=TRUE),
   "SD"   = tapply(response, list(trt), sd, na.rm=TRUE)
 )
print(xtable(descTable, caption = "Descriptive statistics
for each treatment group", label = "table:descriptives"),
caption.placement = "top", include.rownames = FALSE)
@

The analysis of variance is provided in Table \ref{table:anova}.

<<echo=false, results=tex>>=
fit <- aov(response ~ trt)
print(xtable(fit, caption = "Analysis of variance",
```

```
    label = "table:anova"), caption.placement = "top")
@

\noindent and group differences are plotted in Figure \ref{figure:tukey}.

\begin{figure}\label{figure:tukey}
\begin{center}

<<fig=TRUE,echo=FALSE>>=
par(mar=c(5,4,6,2))
tuk <- glht(fit, linfct=mcp(trt="Tukey"))
plot(cld(tuk, level=.05),col="lightgrey",xlab="Treatment", ylab="Response")
box("figure")
@

\caption{Distribution of response times and pairwise comparisons.}
\end{center}
\end{figure}
\end{document}
```

在用R中的Sweave()函数处理完noweb文件后，用LaTeX编译器处理所得到的TeX文件，然后会生成图D-2和图D-3所示的PDF文档。

Sample Report

Robert I. Kabacoff, Ph.D.

1 Results

Cholesterol reduction was assessed in a study that randomized 50 patients to one of 5 treatments. Summary statistics are provided in Table 1.

Table 1: Descriptive statistics for each treatment group

Treatment	N	Mean	SD
1time	10	5.78	2.88
2times	10	9.22	3.48
4times	10	12.37	2.92
drugD	10	15.36	3.45
drugE	10	20.95	3.35

The analysis of variance is provided in Table 2.

Table 2: Analysis of variance

	Df	Sum Sq	Mean Sq	F value	Pr(>F)
trt	4	1351.37	337.84	32.43	0.0000
Residuals	45	468.75	10.42		

and group differences are plotted in Figure1.

图D-2 从代码清单D-1中的示例noweb文件创建的报告的第一页。在R中用Sweave()函数处理noweb文件，然后用LaTeX编译器处理得到的TeX文件，生成PDF文档

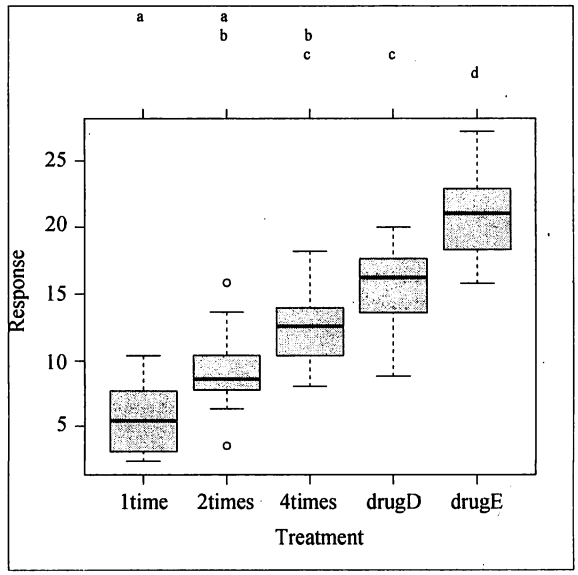


Figure 1: Distribution of response times and pairwise comparisons.

图D-3　用代码清单D-1中的示例noweb文件创建的报告的第二页

关于Sweave的更多信息，请访问Sweave的主页（www.stat.uni-muenchen.de/~leisch/Sweave/）。Theresa Scott提供了一个绝佳的介绍（http://biostat.mc.vanderbilt.edu/TheresaScott）。关于LaTeX的更多信息，可以阅读“The Not So Short Introduction to LaTeX 2e”一文，可在LaTeX主页（www.latex-project.org）上找到。

D.2　用odfWeave整合OpenOffice

用Sweave可以将R代码及其输出嵌入到LaTeX文档中，然后编译成PDF、PostScript或DVI文件。最终生成的文档很漂亮，但却无法编辑。此外，有不少客户要求报告为诸如Word一类的格式。

用odfWeave可以将R代码及其输出嵌入到OpenOffice文档中。不是将R代码块放入LaTeX文档，而是将R代码块放入OpenOffice ODT文件（见图D-3）。ODT文件的一个优势是可以用WYSIWYG（所见即所得）的编辑器创建，这种编辑器如OpenOffice Writer（www.OpenOffice.org）；不需要学习标记语言。

以ODT文件创建noweb文档后，用odfWeave包中的odfWeave()函数对其进行处理。跟Sweave不一样，在第一次使用之前要先下载和安装odfWeave（install.packages("odfWeave")），每个要使用该函数的会话中都要加载这个包。例如：

```
library(odfWeave)
infile <- "example.odt"
outfile <- "example-out.odt"
odfWeave(infile, outfile)
```

这会以图D-4中的example.odt文件作为输入，生成如图D-5所示的example-out.odt文件。在odfWeave()语句前面加上options(SweaveSyntax="SweaveSyntaxNoweb")可以减少一些操作系统上的解析错误。

```
My Sample Report
Robert I. Kabacoff, Ph.D.

<<echo=false, results=hide>>=
library(multcomp)
library(xtable)
attach(cholesterol)
@

1 Results

Cholesterol reduction was assessed in a study that randomized \Sexpr{nrow(cholesterol)}
patients to one of \Sexpr{length(unique(trt))} treatments. Summary statistics are provided in
Table 1.

Table 1. Descriptive Statistics for each treatment group
<<echo = false, results = xml>>=
descTable <- data.frame("Treatment" = sort(unique(trt)),
  "N"    = as.vector(table(trt)),
  "Mean" = tapply(response, list(trt), mean, na.rm=TRUE),
  "SD"   = tapply(response, list(trt), sd, na.rm=TRUE)
 )
odfTable(descTable)
@

The analysis of variance is provided Table 2.

Table 2. Analysis of Variance
<<echo=false>>=
fit <- aov(response ~ trt)
summary(fit)
@

and group differences are plotted in Figure 1.

<<fig=TRUE,echo=FALSE>>=
par(mar=c(5,4,6,2))
tuk <- glht(fit, linfct=mcp(trt="Tukey"))
plot(cld(tuk, level=.05),col="lightgrey",xlab="Treatment", ylab="Response")
box("figure")
@
Figure1. Distribution of response times and pair-wise comparisons.
```

图D-4 要通过odfWeave处理的初始noweb文件（example.odt）

My Sample Report

Robert I. Kabacoff, Ph.D.

1 Results

Cholesterol reduction was assessed in a study that randomized 50 patients to one of 5 treatments. Summary statistics are provided in Table 1.

Table 1. Descriptive Statistics for each treatment group

	Treatment	N	Mean	SD
1time	1time	10	5.782	2.878
2times	2times	10	9.225	3.483
4times	4times	10	12.375	2.923
drugD	drugD	10	15.361	3.455
drugE	drugE	10	20.948	3.345

The analysis of variance is provided Table 2.

Table 2. Analysis of Variance

```
          Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
trt        4 1351.37  337.84  32.433 9.819e-13 ***
Residuals 45  468.75   10.42
---
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

and group differences are plotted in Figure 1.

图D-5 ODF格式的最终报告（example-out.odt）。这个报告的第二页跟图D-2中Sweave输出的第二页类似，为了节约篇幅就不展示了

Sweave和odfWeave之间有如下一些区别。

- odfWeave不能用xtable()函数。默认情况下，odfWeave会将数据框、矩阵和向量渲染成美观的格式。用户也可以用odfTable()函数更加细致的调节这些对象的格式。
- ODF文档使用XML标记，而不是LaTeX。因此，绝不要使用result=tex选项。使用odfTable()的代码块应该使用result=xml。
- 输入文件和输出文件的文件名应该不一样。跟Sweave不一样，odfWeave("example.odt")会用最终的报告覆盖noweb文档。

看图D-4，你会注意到ANOVA表格的格式并不好看（跟Sweave中的效果相比）。这个表格是

R生成的标准的等宽字体。这是因为odfWeave没有对应lm()、glm()等函数返回对象的格式化函数。要正确格式化这些函数的结果，我们需要将对象中感兴趣的部分（在这个例子中就是fit）提取出来，然后将其放入矩阵或数据框中。

在有了ODF格式的报告后，可以继续编辑它，优化格式，转存为ODT、HTML、DOC或DOCX格式。更多信息请参阅odfWeave手册和简介。

D.3 备注

这里介绍的Sweave和odfWeave方法有很多优点。将要执行统计分析的代码直接嵌入到最终报告中，也就明确地记录了结果是怎么计算出来的。哪怕是六个月之后，你还是很容易看出到底做了什么。你可以修改其中的统计分析或添加新的数据，然后毫不费力地重新生成报告。此外，还可以免去复制粘贴和重新格式化结果的痛苦。

不过，享受这些好处的代价是要在前期花费不少精力。另外还有其他一些缺点。如果使用LaTeX，你需要学习一门排版语言。如果使用ODF，你需要使用OpenOffice，这可能并不是你工作环境中的标配。

无论如何，微软的Word和PowerPoint是现在商业界写报告和做演示的标准。R2wd和R2PPT包可以在Word和PowerPoint文档中动态地插入R输出，但它们的开发还处于起步阶段；我们非常期待这两个扩展包发展成熟。

附录 E

R中的矩阵运算

本书中介绍的很多函数都是操作矩阵的。对矩阵的操作已经深深地扎根于R语言中。表E-1中介绍了对解决线性代数问题非常重要的运算符和函数。在表E-1中，A和B是矩阵，x和b是向量，k是标量。

表E-1　用于矩阵代数的R函数和运算符

运算符或函数	描　述
+ - * / ^	分别是逐个元素的加、减、乘、除和幂运算
A %*% B	矩阵乘法
A %o% B	外积。AB'
cbind(A, B, ...)	横向合并矩阵或向量
chol(A)	A的Choleski分解。若R <- chol(A)，那么chol(A)包含上三角因子，即R'R=A
colMeans(A)	返回A的列均值组成的向量
crossprod(A)	A'A
crossprod(A, B)	A'B
colSums(A)	返回A的列总和组成的向量
diag(A)	返回主对角元素组成的向量
diag(x)	用x中元素作为主对角元素创建对角矩阵
diag(k)	如果k是标量，就创建k × k的单位矩阵
eigen(A)	A的特征值和特征向量。若y <- eigen(A)，那么： y$val是A的特征值； y$vec是A的特征向量
ginv(A)	A的Moore-Penrose广义逆（需要MASS包）
qr(A)	A的QR分解。若y <- qr(A)，那么 y$qr的上三角是分解结果，下三角是分解的信息，y$rank是A的秩， y$qraux是Q的附加信息向量，y$pivot是所使用的主元素选择策略
rbind(A, B, ...)	纵向合并矩阵或向量
rowMeans(A)	返回A的行均值组成的向量
rowSums(A)	返回A的行总和组成的向量
solve(A)	A的逆，其中A是方矩阵
solve(A, b)	求解方程b = Ax中的向量x

（续）

运算符或函数	描　述
Svd(A)	A的奇异值分解。若y <- svd(A)，那么y$d是A的奇异值组成的向量，y$u是矩阵且每一列都是A的左奇异向量，y$v是矩阵且每一列都是A的右奇异向量
t(A)	A的转置

还有几个用户贡献的用于矩阵代数的包。matlab包中的包装器函数和变量尽可能模拟MATLAB的函数调用。这些函数可用于将MATLAB程序和代码移植到R。还有一个将MATLAB命令转换成R命令的速查卡（http://mathesaurus.sourceforge.net/octave-r.html）。

Matrix包中的函数使得R可以处理高密度矩阵或稀疏矩阵。可以高效的访问BLAS（Basic Linear Algebra Subroutines）、Lapack （密集矩阵）、TAUCS（稀疏矩阵）和UMFPACK（稀疏矩阵）。

最后是matrixStats包，其中提供了操作矩阵中行和列的方法，包括计数、求和、乘积、居中趋势（central tendency）、离散度等的计算函数。这里的每一个方法都在速度和内存效率上做了优化。

附录F 本书中用到的扩展包

R正是因为有着大量开发人员的无私贡献才变得无所不能、强大异常。表F-1中列出了本书中介绍过的扩展包，以及有它们出现的各章的章号。

表F-1 本书中用到的扩展包

扩展包	作者	描述	章
AER	Christian Kleiber和Achim Zeileis	Christian Kleiber和Achim Zeileis撰写的*Applied Econometrics with R*一书中的函数、数据集、例子、演示和简介	13
Amelia	James Honaker、Gary King和Matthew Blackwell	Amelia II，一个通过多重插补处理缺失值的程序	15
arrayImpute	Eun-kyung Lee、Dankyu Yoon和Taesung Park	用于处理微阵列数据中缺失值的包	15
arrayMissPattern	Eun-kyung Lee和Taesung Park	微阵列数据中缺失模式的探索分析	15
boot	S版最初是Angelo Canty开发的。R版是Brian Ripley开发的	bootstrap函数	12
ca	Michael Greenacre和Oleg Nenadic	简单、多元、联合对应分析	7
car	John Fox和Sanford Weisberg	应用回归分析配套材料	1、8、9、10、11
cat	Ted Harding和Fernando Tusell将其移植到R。最初由Joseph L. Schafer开发	带缺失值的类别型变量数据集分析	15
coin	Torsten Hothorn、Kurt Hornik、Mark A. van de Wiel和Achim Zeileis	置换检验框架中的条件推断函数	12
corrgram	Kevin Wright	绘制相关图	11
corrperm	Douglas M. Potter	带重复测量的相关性置换检验	12
doBy	Sφren Hφjsgaard开发，Kevin Wright和Alessandro A. Leidi也作出了贡献	分组计算摘要统计量、广义线性对比及其他工具	7

（续）

扩 展 包	作 者	描 述	章
effects	John Fox和Jangman Hong	线性、广义线性、multinomial-logit以及proportional-odds logit模型的效果显示	8、9
FactoMineR	Francois Husson、Julie Josse、Sebastien Le和Jeremy Mazet	R中的多元探索分析和数据挖掘	14
FAiR	Ben Goodrich	用遗传算法进行因子分析	14
fCalendar	Diethelm Wuertz和Yohan Chalabi	时序对象（chronological object）和日历对象的相关函数	4
foreign	R核心成员和Saikat DebRoy、Roger Bivand等人	读取Minitab、S、SAS、SPSS、Stata、Systat、dBase等其他软件存储的数据	2
gclus	Catherine Hurley	聚类图形	1、11
ggplot2	Hadley Wickam	图形语法的实现	16
glmPerm	Wiebke Werft和Douglas M. Potter	广义线性模型中用于推断的置换检验	12
gmodels	Gregory R. Warnes。包含Ben Bolker、Thomas Lumley和Randall C Johnson贡献的R源代码和文档。其中Randall C. Johnson的贡献属SAIC-Frederick公司版权所有（2005）	各种用于模型拟合的R编程工具	7
gplots	Gregory R. Warnes。包含Ben Bolker、Lodewijk Bonebakker、Robert Gentleman、Wolfgang Huber Andy Liaw、Thomas Lumley、Martin Maechler、Arni Magnusson、Steffen Moeller、Marc Schwartz和Bill Venables贡献的R代码和文档	各种绘制图形的R编程工具	6、9
grid	Paul Murrell	重写了图形布局功能，还提供了交互功能	16
gvlma	Edsel A. Pena和Elizabeth H. Slate	线性模型假设的全局检验	8
hdf5	Marcus G. Daniels	NCSA HDF5库的接口	2
hexbin	Dan Carr开发，由Nicholas Lewin-Koh和Martin Maechler移植	绘制六边形箱图的函数	11
HH	Richard M. Heiberger	Heiberger和Holland的*Statistical Analysis and Data Display*一书的配套软件	9
Hmisc	Frank E Harrell Jr，以及很多其他用户的贡献	Harrrell的各种用于数据分析、高级绘图、实用操作的函数	2、3、7
kmi	Arthur Allignol	竞争风险中用于累积发生函数分析的Kaplan-Meier多元插补（imputation）	15
lattice	Deepayan Sarkar	Lattice图形	16

（续）

扩展包	作者	描述	章
latticist	Felix Andrews	用于探索性可视化的图形界面	16
lavaan	Yves Rosseel	潜变量模型的相关函数，包括验证性因子分析、结构方程建模和潜增长曲线模型等	14
lcda	Michael Buecker	潜分类判别分析	14
leaps	Thomas Lumley，用到了Alan Miller的Fortran代码	回归子集选择，包括穷举搜索	8
lmPerm	Bob Wheeler	线性模型的置换检验	12
logregperm	Douglas M. Potter	逻辑回归中推断的置换检验	12
longitudinalData	Christophe Genolini	用于纵向数据分析的工具	15
lsa	Fridolin Wild	潜语义分析	14
ltm	Dimitris Rizopoulos	项目反应理论（item response theory）中的潜在特质模型（Latent trait model）	14
lubridate	Garrett Grolemund 和 Hadley Wickham	用于识别和解析日期、时间数据的函数，可以抽取和修改日期和时间，对日期和时间做精确的运算，还可以处理时区和夏时制（Daylight Savings Time）	4
MASS	最初S语言的版本由Venables和Ripley开发，由Brian Ripley在Kurt Hornik和Albrecht Gebhardt的工作基础之上将其移植到R	Venables和Ripley撰写的Modern Applied Statistics with S第四版的配套函数和数据集	4、5、7、8、9、12
mlogit	Yves Croissant	估计多项logit模型（multinomial logit model）	13
multcomp	Torsten Hothorn、Frank Bretz Peter Westfall、Richard M. Heiberger、和Andre Schuetzenmeister	参数模型中的常见线性假设的同时检验和置信区间计算，包括线性、广义线性、线性混合效应和生存模型	9、12
mvnmle	Kevin Gross，Douglas Bates提供了帮助	带缺失值的多元正态数据的ML估计	15
mvoutlier	Moritz Gschwandtner 和 Peter Filzmoser	基于稳健方法的多元异常值检测	9
Ncdf、ncdf4	David Pierce	Unidata netCDF数据文件的接口	2
nFactors	Gilles Raiche	Cattell碎石检验的并行分析和非图形解决方案	14
npmc	Joerg Helms和Ullrich Munzel	非参数多重比较	7
OpenMx	Steven Boker、Michael Neale、Hermine Maes、Michael Wilde、Michael Spiegel、Timothy R. Brick、Jeffrey Spies、Ryne Estabrook、Sarah Kenny、Timothy Bates、Paras Mehta和John Fox	高级结构方程建模	14

（续）

扩 展 包	作 者	描 述	章
pastecs	Frederic Ibanez、Philippe Grosjean和Michele Etienne	用于时空生态数据分析的包	7
piface	Russell Lenth开发，R包接口由Tobias Verbeke开发	用于统计效力和样本大小评估的Java小程序	10
playwith	Felix Andrews	用于编辑R图形，以及与之互动的GTK+图形用户界面	16
poLCA	Drew Linzer和Jeffrey Lewis	多分类变量的潜类别分析	14
psych	William Revelle	用于心理、心理测评和个性研究的函数	7、14
pwr	Stephane Champely	功效分析的基本函数	10
qcc	Luca Scrucca	质量控制图形	13
randomLCA	Ken Beath	随机效应潜类别分析	14
Rcmdr	John Fox开发，Liviu Andronic、Michael Ash、Theophilius Boye、Stefano Calza、Andy Chang、Philippe Grosjean、Richard Heiberger、G. Jay Kerns、Renaud Lancelot、Matthieu Lesnoff、Uwe Ligges、Samir Messad、Martin Maechler、Robert Muenchen、Duncan Murdoch、Erich Neuwirth、Dan Putler、Brian Ripley、Miroslav Ristic和Peter Wolf也作出了贡献	R Commander是一个基于tcltk包的R跨平台图形用户界面，可以实现基本的统计学分析	11
reshape	Hadley Wickham	灵活地改变数据形式	4、5、7
rggobi	Duncan Temple Lang、Debby Swayne、Hadley Wickham和Michael Lawrence	R和GGobi之间的接口	16
rgl	Daniel Adler和Duncan Murdoch	3D可视化设备系统（OpenGL）	11
RJDBC	Simon Urbanek	实现了通过JDBC接口访问数据库的功能	2
rms	Frank E. Harrell, Jr.	回归建模，包含用于简化或帮助简化回归建模、检验、估计、验证、画图、预测和排版的约255个函数	13
robust	Jiahui Wang、Ruben Zamar、Alfio Marazzi、Victor Yohai、Matias Salibian-Barrera、Ricardo Maronna、Eric Zivot、David Rocke、Doug Martin、Martin Maechler和Kjell Konis	稳健方法的包	13

（续）

扩展包	作者	描述	章
RODBC	Brian Ripley和Michael Lapsley	ODBC数据库访问接口	2
ROracle	David A. James和Jake Luciani	R的Oracle数据库接口	2
rrcov	Valentin Todorov	位置和散点的稳健估计（robust location and scatter estimation），以及带高失效点（high breakdown point）的稳健多元分析	9
sampling	Yves Till é 和Alina Matei	用于绘制和校正样本的函数	4
scatterplot3d	Uwe Ligges	绘制三维散点云	11
sem	John Fox开发，Adam Kramer和Michael Friendly也作出了贡献	结构方程模型	14
SeqKnn	Ki-Yeol Kim 和 Gwan-Su Yi，CSBio实验室，信息和通信大学（Information and Communications University）	序列化KNN插补方法	15
sm	Adrian Bowman 和 Adelchi Azzalini开发。2.0版本之前都是由B. D. Ripley移植到R，2.1版是由 Adrian Bowman 和 Adelchi Azzalini移植的，版本2.2是由Adrian Bowman移植的	用于非参回归和密度估计的平滑方法	6、9
vcd	David Meyer、Achim Zeileis和Kurt Hornik	用于类别数据可视化的函数	1、6、7、11、12
vegan	Jari Oksanen、F. Guillaume Blanchet、Roeland Kindt、Pierre Legendre、R. B. O'Hara、Gavin L. Simpson、Peter Solymos、M. Henry H. Stevens 和 Helene Wagner	种群和植物生态学家所使用的排序方法（ordination method）、多样性分析（diversity analysis）等函数	9
VIM	Matthias Templ、Andreas Alfons和Alexander Kowarik	缺失值插补和可视化	15
xlsx	Adrian A. Dragulescu	读写和格式化Excel 2007（xlsx）文件	2
XML	Duncan Temple Lang	R和S-Plus中用于解析和生成XML的工具	2

附录G 处理大数据

R将所有的对象都存储在虚拟内存中。对于大部分人而言，这种设计可以带来很好的交互体验，但如果要处理大型数据，这就会影响程序的运行速度，带来和内存相关的错误。

具体的内存限制取决于R的版本（32位或64位）和所使用的操作系统。以`cannot allocate vector of size`开头的错误信息通常都是因为无法获得足够的连续内存空间，以`cannot allocate vector of length`开头的错误信息表示超过了内存地址的限制。在处理大型数据时，应该尽可能地用64位版。无论是什么版本，单个向量中元素数量的上限都是2 147 483 647（详见`?Memory`）。

在处理大数据时，要考虑三个问题：(a)高效执行的程序，(b)将数据保存到外部避免内存问题，以及(c)用有针对性的统计方法高效地分析海量数据。我们会对这三个问题做简要介绍。

G.1 高效程序设计

下面是在处理大型数据时有助于提升性能的程序设计建议。

- 尽可能地做向量化计算。用R内建的函数来处理向量、矩阵和列表（例如`sapply`、`lapply`和`mapply`），而且要尽量避免使用循环（`for`和`while`）。
- 用矩阵，而不是数据框（矩阵更轻量级）。
- 在使用`read.table()`系列函数将外部数据读取到数据框中时，明确的指定`colClasses`和`nrows`，设置`comment.char = ""`，并且用`"NULL"`标明不需要的列。这可降低内存使用量，显著地提高处理速度。在将外部数据读入矩阵时，可以用`scan()`函数。
- 在完整的数据集上运行程序之前，请先用数据的子集测试程序，以便优化代码并消除bug。
- 删除临时对象和不再需要的对象。调用`rm(list=ls())`会从内存中删除所有的对象，得到一个干净的环境。要删除特定的对象，可以用`rm(object)`。
- 在Jeromy Anglim的博客文章“Memory Management in R: A Few Tips and Tricks”（jeromyanglim.blogspot.com）中介绍了`.ls.objects()`函数，可以使工作空间中的所有对象按大小（MB）排列。这个函数可以帮你找到内存消耗的大户。
- 测试程序中每个函数所消耗的时间。用`Rprof()`和`summaryRprof()`函数就可以完成这个测试。`system.time()`函数也能用得上。`profr`和`prooftools`包提供用于分析测试

结果的函数。

- 如果需要进一步优化代码的话，Rcpp包可以将R对象转换成C++函数。

在处理大数据时，提高代码性能也就只能这样了。在遇到内存限制时，我们还可以将数据保存到外部存储器中，并使用特殊的分析方法。

G.2　在内存外存储数据

有好几个包可以将数据保存到R的主内存之外。主要的方法是将数据保存到外部数据库中，或是硬盘上的二进制文件中，然后再按需要访问其中的某个部分。表G-1中列出了一些有用的包。

表G-1　用于访问大型数据集的R包

包	描　述
ff	提供了一种数据结构，可以将数据保存到硬盘上，但用起来却像是在内存中
bigmemory	支持大型矩阵的创建、存储、访问和操作。矩阵可以分配在共享内存和内存映射文件中
filehash	实现了一个简单的key-value数据库，用字符串的键值关联到硬盘上存储的数据值
ncdf、ncdf4	提供了Unidate netCDF数据文件的接口
RODBC、RMySQL、ROracle、RPostgreSQL、RSQLite	这些包每一个都可用于访问相应的外部关系型数据库管理系统

上面介绍的这些包都可用于解决R在保存数据时的内存限制问题。不过，在分析大数据时，还需要专门的方法以在可接受的时间内完成分析。下面会介绍其中最有用的一些。

G.3　用于大数据的分析包

R有如下几个用于分析大型数据的包。

- biglm和speedglm包能以内存高效的方式实现大型数据的线性模型拟合和广义线性模型拟合。
- 有好几个包是用来分析bigmemory包生成的大型矩阵的。biganalytics包提供了k均值聚类、列统计和一个biglm的封装。bigtabulate包提供了table()、split()和tapply()功能；bigalgebra包提供了高级的线性代数函数。
- biglars包跟ff配合使用，为在内存中无法放置的大数据提供了最小角回归（least-angle regression）、lasso和逐步回归分析。
- Borbdingnag包可以处理大数字（大于2的1024次方的数）。

在任何编程语言中，处理GB级和TB级的数据都是挑战。关于R中这方面方法的更多信息，可以查看CRAN上的这个Task View：High-Performance and Parallel Computing with R（cran.r-project org/web/views/）。

附录H 更新R

作为消费者，我们理所当然地认为可以通过一个检查更新按钮升级软件。在第1章中，我们知道`update.packages()`可以下载和安装最新版的第三方扩展包。不过，并没有相应的函数来升级R自身。如果要将R 4.1.0升级到R 5.1.1，必须得动动脑子。（在我写这本书时，最新的版本是2.13.0，但我希望这本书能够跟上未来若干年的发展。）

从CRAN（http://cran.r-project.org/bin/）下载和安装最新版的R是比较简单的。麻烦的地方是要重新设置各种自定义选项（包括之前安装的扩展包）。在当前所使用的R中，我安装了248个扩展包。我真心不想在升级R的时候把这些扩展包的名字一个个写下来，然后手动地重新安装。

在网络上有很多关于如何高效优雅地更新R的讨论。下面介绍的方法既不优雅，也不高效，但我发现它在各种系统（Windows、Mac和Linux）上都可以使用。

在这里，我们用`installed.packages()`函数保存R目录树之外的扩展包清单，然后根据这个清单用`install.packages()`函数将最新版的扩展包下载和安装到新版R中。操作步骤如下。

(1) 如果有自定义的Rprofile.site文件（见附录B），将其保存到R目录树之外。

(2) 启动当前版本的R，然后执行下面的命令：

```
oldip <- installed.packages()[,1]
save(oldip, file="path/installedPackages.Rdata")
```

其中*path*是R之外的目录。

(3) 下载安装新版的R。

(4) 如果在第(1)步保存了自定义的Rprofile.site文件，现在把它复制到新的R中。

(5) 启动新版本的R，然后执行下面的命令：

```
load("path/installedPackages.Rdata")
newip <- installed.packages()[,1]
for(i in setdiff(oldip, newip))
  install.packages(i)
```

其中*path*是第(2)步中设置的位置。

(6) 删除旧版本（可选）。

这种方法只能安装CRAN上的扩展包，不会安装从其他地方获取的包。你需要自行寻找和下载这些包。不过，你可以知道哪些包不能安装。我在上次安装R时发现不能找到`globaltest`和`Biobase`。因为我是从Bioconductor网站上安装这两个扩展包的，能用下面的命令安装：

```
source(http://bioconductor.org/biocLite.R)
biocLite("globaltest")
biocLite("Biobase")
```

第(6)步可以选择将老版本的R删除。在Windows系统上可以同时安装多个版本的R。如果需要的话，可以通过`Start > Control Panel > Uninstall a Program`卸载旧版本的R。在Mac和Linux系统上，新版的R会覆盖老版本。在Mac上要删除剩余的东西，可以用Finder打开/Library/Frameworks/R.frameworks/versions/，删除其中旧版本的文件夹。在Linux系统上，不需要做任何额外的操作。

显然，更新R比想象的要复杂得多。我希望能有一天，这个附录只需要一句话："选择检查更新选项。"

参考文献

Allison, P. 2001. *Missing Data.* Thousand Oaks, CA: Sage.

Allison, T., and D. Chichetti. 1976. "Sleep in Mammals: Ecological and Constitutional Correlates." *Science* 194 (4266): 732–734.

Anderson, M. J. 2006. "Distance-Based Tests for Homogeneity of Multivariate Dispersions." *Biometrics* 62:245–253.

Baade, R., and R. Dye. 1990. "The Impact of Stadiums and Professional Sports on Metropolitan Area Development." *Growth and Change* 21:1–14.

Bandalos, D. L., and M. R. Boehm-Kaufman. 2009. "Four Common Misconceptions in Exploratory Factor Analysis." In *Statistical and Methodological Myths and Urban Legends,* edited by C. E. Lance and R. J. Vandenberg, 61–87. New York: Routledge.

Bates, D. 2005. "Fitting Linear Mixed Models in R." *R News* 5 (1). www.r-project.org/doc/Rnews/Rnews_2005-1.pdf.

Breslow, N., and D. Clayton. 1993. "Approximate Inference in Generalized Linear Mixed Models." *Journal of the American Statistical Association* 88:9–25.

Bretz, F., T. Hothorn, and P. Westfall. 2010. *Multiple Comparisons Using R.* Boca Raton, FL: Chapman & Hall.

Canty, A. J. 2002. "Resampling Methods in R: The boot Package." http://cran.r-project.org/doc/Rnews/Rnews_2002-3.pdf.

Chambers, J. M. 2008. *Software for Data Analysis: Programming with R.* New York: Springer.

Cleveland, W. 1981. "LOWESS: A Program for Smoothing Scatter Plots by Robust Locally Weighted Regression." *The American Statistician* 35:54.

———. 1985. The *Elements of Graphing Data.* Monterey, CA: Wadsworth.

———. 1993. *Visualizing Data.* Summit, NJ: Hobart Press.

Cohen, J. 1988. *Statistical Power Analysis for the Behavioral Sciences,* 2nd ed. Hillsdale, NJ: Lawrence Erlbaum.

Cook, D., and D. Swayne. 2008. *Interactive and Dynamic Graphics for Data Analysis with R and GGobi.* New York: Springer.

Coxe, S., S. West, and L. Aiken. 2009. "The Analysis of Count Data: A Gentle Introduction to Poisson Regression and Its Alternatives." *Journal of Personality Assessment* 91:121–136.

Culbertson, W., and D. Bradford. 1991. "The Price of Beer: Some Evidence for Interstate Comparisons." *International Journal of Industrial Organization* 9:275–289.

DiStefano, C., M. Zhu, and D. Mîndrilă. 2009. "Understanding and Using Factor Scores: Considerations for the Applied Researcher." *Practical Assessment, Research & Evaluation* 14 (20). http://pareonline.net/pdf/v14n20.pdf.

Dobson, A., and A. Barnett. 2008. *An Introduction to Generalized Linear Models,* 3rd ed. Boca Raton, FL: Chapman & Hall.

Dunteman, G., and M-H Ho. 2006. *An Introduction to Generalized Linear Models.* Thousand Oaks, CA: Sage.

Efron, B., and R. Tibshirani. 1998. *An Introduction to the Bootstrap.* New York: Chapman & Hall.

Fair, R. C. 1978. "A Theory of Extramarital Affairs." *Journal of Political Economy* 86:45–61.

Faraway, J. 2006. *Extending the Linear Model with R: Generalized Linear, Mixed Effects and Nonparametric Regression Models.* Boca Raton, FL: Chapman & Hall.

Fox, J. 2002. *An R and S-Plus Companion to Applied Regression.* Thousand Oaks, CA: Sage.

———. 2002. "Bootstrapping Regression Models." http://mng.bz/pY9m.

———. 2008. *Applied Regression Analysis and Generalized Linear Models.* Thousand Oaks, CA: Sage.

Fwa, T., ed. 2006. *The Handbook of Highway Engineering,* 2nd ed. Boca Raton, FL: CRC Press.

Good, P. 2006. *Resampling Methods: A Practical Guide to Data Analysis,* 3rd ed. Boston: Birkhäuser.

Gorsuch, R. L. 1983. *Factor Analysis,* 2nd ed. Hillsdale, NJ: Lawrence Erlbaum.

Greene, W. H. 2003. *Econometric Analysis,* 5th ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall.

Grissom, R., and J. Kim. 2005. *Effect Sizes for Research: A Broad Practical Approach.* Mahwah, NJ: Lawrence Erlbaum.

Groemping, U. 2009. "CRAN Task View: Design of Experiments (DoE) and Analysis of Experimental Data." http://mng.bz/r45q.

Hand, D. J. and C. C. Taylor. 1987. *Multivariate Analysis of Variance and Repeated Measures.* London: Chapman & Hall.

Harlow, L., S. Mulaik, and J. Steiger. 1997. *What If There Were No Significance Tests?* Mahwah, NJ: Lawrence Erlbaum.

Hayton, J. C., D. G. Allen, and V. Scarpello. 2004. "Factor Retention Decisions in Exploratory Factor Analysis: A Tutorial on Parallel Analysis." *Organizational Research Methods* 7:191–204.

Hsu, S., M. Wen, and M. Wu. 2009. "Exploring User Experiences as Predictors of MMORPG Addiction." *Computers and Education* 53:990–999.

Jacoby, W. G. 2006. "The Dot Plot: A Graphical Display for Labeled Quantitative Values." *Political Methodologist* 14:6–14.

Johnson, J. 2004. "Factors Affecting Relative Weights: The Influence of Sample and Measurement Error." *Organizational Research Methods* 7:283–299.

Johnson, J., and J. Lebreton. 2004. "History and Use of Relative Importance Indices in Organizational Research." *Organizational Research Methods* 7:238–257.

Koch, G., and S. Edwards. 1988. "Clinical Efficiency Trials with Categorical Data." *In Statistical Analysis with Missing Data*, 2nd ed., by R. J. A. Little and D. Rubin. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2002.

LeBreton, J. M, and S. Tonidandel. 2008. "Multivariate Relative Importance: Extending Relative Weight Analysis to Multivariate Criterion Spaces." *Journal of Applied Psychology* 93:329–345.

Lemon, J., and A. Tyagi. 2009. "The Fan Plot: A Technique for Displaying Relative Quantities and Differences." *Statistical Computing and Graphics Newsletter* 20:8–10.

Licht, M. 1995. "Multiple Regression and Correlation." In *Reading and Understanding Multivariate Statistics*, edited by L. Grimm and P. Yarnold. Washington, DC: American Psychological Association, 19–64.

McCall, R. B. 2000. *Fundamental Statistics for the Behavioral Sciences*, 8th ed. New York: Wadsworth.

McCullagh, P., and J. Nelder. 1989. *Generalized Linear Models*, 2nd ed. Boca Raton, FL: Chapman & Hall.

Meyer, D., A. Zeileis, and K. Hornick. 2006. "The Strucplot Framework: Visualizing Multi-way Contingency Tables with vcd." *Journal of Statistical Software* 17:1–48. www.jstatsoft.org/v17/i03/paper.

Montgomery, D. C. 2007. *Engineering Statistics*. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons.

Mooney, C., and R. Duval. 1993. *Bootstrapping: A Nonparametric Approach to Statistical Inference*. Monterey, CA: Sage.

Mulaik, S. 2009. *Foundations of Factor Analysis*, 2nd ed. Boca Raton, FL: Chapman & Hall.

Murphy, K., and B. Myors. 1998. *Statistical Power Analysis: A Simple and General Model for Traditional and Modern Hypothesis Tests*. Mahwah, NJ: Lawrence Erlbaum.

Murrell, P. 2006. *R Graphics*. Boca Raton, FL: Chapman & Hall/CRC.

Nenadic, O., and M. Greenacre. 2007. "Correspondence Analysis in R, with Two- and Three-Dimensional Graphics: The ca Package." *Journal of Statistical Software* 20 (3). www.jstatsoft.org/v20/i03/.

Peace, K. E., ed. 1987. *Biopharmaceutical Statistics for Drug Development*. New York: Marcel Dekker, 403–451.

Pena, E., and E. Slate. 2006. "Global Validation of Linear Model Assumptions." *Journal of the American Statistical Association* 101:341–354.

Pinheiro, J. C., and D. M. Bates. 2000. *Mixed-Effects Models in S and S-PLUS*. New York: Springer.

Potvin, C., M. J. Lechowicz, and S. Tardif. 1990. "The Statistical Analysis of Ecophysiological Response Curves Obtained from Experiments Involving Repeated Measures." *Ecology* 71:1389–1400.

Rosenthal, R., R. Rosnow, and D. Rubin. 2000. *Contrasts and Effect Sizes in Behavioral Research: A Correlational Approach*. Cambridge, UK: Cambridge University Press.

Sarkar, D. 2008. *Lattice: Multivariate Data Visualization with R*. New York: Springer.

Schafer, J., and J. Graham. 2002. "Missing Data: Our View of the State of the Art." *Psychological Methods* 7:147–177.

Schlomer, G., S. Bauman, and N. Card. 2010. "Best Practices for Missing Data Management in Counseling Psychology." *Journal of Counseling Psychology* 57:1–10.

Shah, A. 2005. "Getting started with the boot package." www.mayin.org/ajayshah/KB/R/documents/boot.html.

Silva, R. B., D. F. Ferreirra, and D. A. Nogueira. 2008. "Robustness of Asymptotic and Bootstrap Tests for Multivariate Homogeneity of Covariance Matrices." *Ciênc. agrotec.* 32:157–166.

Simon, J. 1997. "Resampling: The New Statistics." www.resample.com/content/text/index.shtml.

Snedecor, G. W., and W. G. Cochran. 1988. *Statistical Methods,* 8th ed. Ames, IA: Iowa State University Press.

UCLA: Academic Technology Services, Statistical Consulting Group. 2009. http://mng.bz/a9c7.

van Buuren, S., and K. Groothuis-Oudshoorn. 2010. "MICE: Multivariate Imputation by Chained Equations in R." *Journal of Statistical Software,* forthcoming. http://mng.bz/3EH5.

Venables, W. N., and B. D. Ripley. 1999. *Modern Applied Statistics with S-PLUS,* 3rd ed. New York: Springer.

———. 2000. *S Programming.* New York: Springer.

Westfall, P. H., et al. 1999. *Multiple Comparisons and Multiple Tests Using the SAS System.* Cary, NC: SAS Institute.

Wickham, H. 2009a. *ggplot2: Elegant Graphics for Data Analysis.* New York: Springer.

———. 2009b. "A Layered Grammar of Graphics." *Journal of Computational and Graphical Statistics* 19:3–28.

Wilkinson, L. 2005. *The Grammar of Graphics.* New York: Springer-Verlag.

Yu, C. H. 2003. "Resampling Methods: Concepts, Applications, and Justification." *Practical Assessment, Research & Evaluation,* 8 (19). http://pareonline.net/getvn.asp?v=8&n=19.

Yu-Sung, S., et al. 2010. "Multiple Imputation with Diagnostics (mi) in R: Opening Windows into the Black Box." *Journal of Statistical Software.* www.jstatsoft.org.

Zuur, A. F., et al. 2009. *Mixed Effects Models and Extensions in Ecology with R.* New York: Springer.